

# TESE DE MESTRADO

Tunelamento Assistido por Caos em Estados  
Localizados

*Josefina Moraes Arraut*

Orientador: Marcus A.M.de Aguiar

UNICAMP

IFGW

Campinas, São Paulo

24 de Junho de 2002

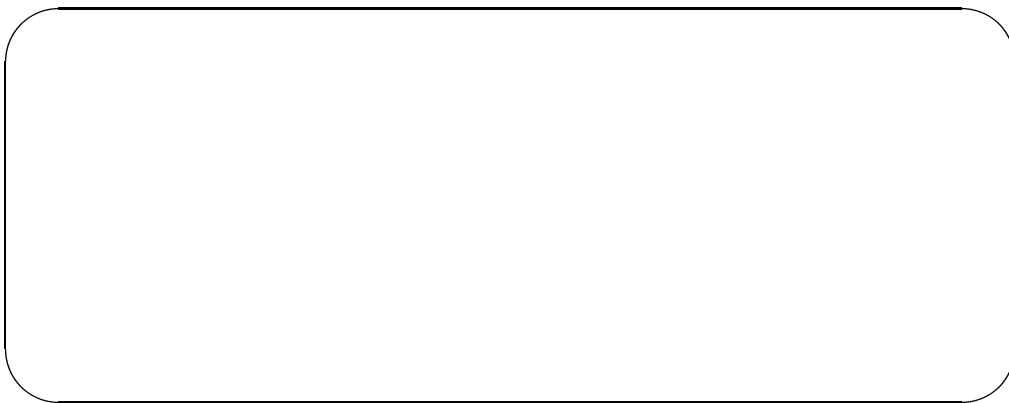
# TESE DE MESTRADO

## TUNELAMENTO ASSISTIDO POR CAOS EM ESTADOS LOCALIZADOS

*Josefina Moraes Arraut*

Banca Examinadora:

- Marcus A.M.de Aguiar(Orientador)
- Kyoko Furuya
- Ricardo Egydio de Carvalho



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN”  
Campinas, São Paulo



Aos meus pais, aos pais dos meus pais, aos pais deles, e aos pais anteriores, a quem devo a oportunidade de estar vivendo e de ter irmãos, dedico este meu primeiro trabalho.

Dedico também aos tios Carlos e Zilda.

# Agradecimentos

Agradeço aos meus pais pelo amor que sempre me dedicaram, e porque a eles devo tudo e todas as oportunidades. Tenho neles o exemplo de correção e superação dos obstáculos. Quero como eles almejar sempre mais além.

Agradeço ao meu irmão Eduardo pela convivência harmoniosa e divertida que tivemos morando juntos aqui em Campinas, pela amizade e por ser tão próximo que por vezes não sei mesmo onde termina ele e começo eu.

Agradeço ao Marcus, que com sua gentileza e paciência conseguiu aliviar o peso das minhas dificuldades, ao longo deste trabalho pude aprender com a sua intuição e eficiência. Ainda por muitos anos poderei crescer com a referência do seu exemplo. Obrigada!

Agradeço ao Rique por ter sido um companheiro completo e imprescindível, pela confiança e sinceridade que nos unem mais e mais, e pela beleza da nossa convivência, alimentada por sua personalidade surpreendente.

Além disto, suas habilidades de programador e relacionadas à informática de uma maneira geral, foram a minha salvação em diversas ocasiões. Seu talento científico o torna capaz de contribuir mesmo em discussões que se afastam do seu tema específico de estudo. Tive com ele muitas, e muito esclarecedoras.

Agradeço aos tios Carlos e Zilda pelo interesse que demonstraram sempre pelo desenvolvimento do Edu e meu e pelas nossas formações profissionais. Obrigada também pelo carinho que manifestaram por nós desde que eramos crianças.

Agradeço à Angela e George Kleiman pela forma amistosa e acolhedora com que receberam meu irmão e eu em sua casa, permitindo que lá morássemos. Graças a eles pudemos morar juntos neste período.

Agradeço ao Raul pela ajuda preciosa que me deu na minha iniciação ao cálculo numérico e à linguagem C, também pela amizade que tem comigo e com a minha família.

Agradeço ao Paulo Veiga, que foi um excelente orientador. Proporcionou-me uma formação na iniciação científica que tem sido muito útil e guiou-me também

na decisão sobre a continuação dos estudos, discutindo as diferentes possibilidades e contatando bons pesquisadores em cada área de interesse. Tenho verificado que suas opiniões e propostas são sempre acertadas.

Agradeço aos amigos do Instituto de Física que fizeram estes anos muito agradáveis e ricos: Roldão, Célio, Daniel, Nury, Julio, Maya, Lázaro, Alexandre (Cab.), Ana Luiza, Ana Lúcia, Sérgio, Cinthia, Marcus Vinícius, Roma, Cristiano, Rildo, Alex, Pablo, Monica, Pepe, Luiz Gregório, Doretto, Vitor, Walter, Demétrio, Jefferson, Tersio, Pila, Elso, Cris, Renato, Cibelle, Silvia, Cleber e muitos outros.

À Nury e ao Dani agradeço pelas experiências que trocamos através de longas conversas e pelo respeito mútuo com que sempre conseguimos conduzir discussões sobre assuntos delicados.

À Maria Ignez, Armando, Carlinhos e Del Carmen pela forma organizada e eficiente com que conduzem a Coordenadoria de Pós-Graduação do IFGW, facilitando muita a vida dos estudantes.

Às queridas D.Terzinha e D.Ivone que por anos mantiveram limpo nosso ambiente de trabalho e tornarem-no mais alegre com seu cuidado pelas plantas do prédio. Todos os dias nos ofereceram um exemplo discreto de humildade e simplicidade.

Agradeço aos amigos que formaram parte comigo da diretoria da APGF (ano 2000): Rique, Alexandre, Marcus Vinícius, Ana Luiza, Ana Lúcia, Cristiano, Cinthia e Jefferson, pelo muito que aprendi com essa experiência. Também ao Julio, Rildo, Elso, Lázaro e Sérgio, sempre interessados e informados sobre questões da política universitária e nacional.

Aos amigos Lucia, Célio, Roldão, Vitória, Lim, Leong, Adreane, Erika, Rafael, Jeferson, Guilherme, Walter, Marcello e Fábio, por nossas discussões das quartas-feiras e por seu esforço sincero de auto questionamento do qual sou testemunha.

A Sim Soon Hock pelo seu interesse pela humanidade e seu trabalho no Brasil, em particular com a formação ética de jovens. Ao Lim, à Lucia e ao Inty por sua perseverança e dedicação a um trabalho tão importante e tão incomum.

Agradeço em especial  
o apoio da FAPESP

# Resumo

Neste trabalho estudamos a influência do caos sobre o tunelamento de partículas. Utilizamos como modelo um potencial unidimensional, quártico, do tipo poço duplo, perturbado por um termo periodicamente dependente do tempo. A perturbação introduz caos, tornando o sistema misto, isto é, fazendo com que apresente ilhas de movimento regular imersas em um mar de caos em seu espaço de fase. Alterando a amplitude e a frequência da perturbação periódica conseguimos variar o número, a disposição e o tamanho das ilhas regulares, e a quantidade de caos que as separa. Estudamos a propagação de pacotes de onda localizados neste potencial, utilizando-os como representações semiclássicas de partículas.

Observamos que, no regime semiclássico em que trabalhamos (pacotes localizados), a região de interesse é a fronteira entre regularidade e caos. O principal efeito quântico atuante nesta região é a reflexão, não o tunelamento. Observamos no entanto que a presença do caos favorece o tunelamento dos pacotes de onda neste regime.

# Abstract

We have studied the effects of chaos on the tunneling of particles. As a model we used a one dimensional double well-type quartic potential, perturbed by a periodic driving. The driving force introduces chaos and the system becomes mixed, exhibiting islands of regular motion immersed in a sea of chaos in its classical phase space. By altering the amplitude and the frequency of the periodic driving we were able to vary the number, disposition and size of the regular islands, and the amount of chaos in between them. We studied the propagation of localized wave packets in this potential, using them as semiclassical representations of particles.

We observed that, in the semiclassical regime in which we have worked (localized wave packets), the region of interest is the border between regularity and chaos. The main quantum effect at play in this region is reflection, not tunneling. We observed however, that the presence of chaos favours the tunneling of wave packets in this regime.

# Conteúdo

<b>Resumo</b>	<b>vii</b>
<b>Abstract</b>	<b>viii</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Dubletos de Tunelamento . . . . .	3
1.2 Tunelamento assistido por caos . . . . .	6
1.3 Sistemas periodicamente dependentes do tempo . . . . .	7
1.4 Observações experimentais do tunelamento assistido por caos e do tunelamento dinâmico . . . . .	9
1.5 Objetivos Deste Trabalho . . . . .	9
<b>2 A Dinâmica Clássica</b>	<b>13</b>
2.1 A Dinâmica Clássica com Potencial Dependente do Tempo . . . . .	14
2.1.1 Mapas Estroboscópicos . . . . .	15
2.1.2 Órbitas . . . . .	20
<b>3 A Dinâmica Quântica</b>	<b>25</b>
3.1 Caso Independente do Tempo . . . . .	25
3.2 A Dinâmica Quântica com Potencial Dependente do Tempo . . . . .	27
3.2.1 Estados de Floquet . . . . .	28
3.2.2 Discretização da Equação de Schrödinger . . . . .	31
3.2.3 Solução da Equação de Schrödinger via FFT . . . . .	34
<b>4 Tunelamento</b>	<b>38</b>
<b>5 Resultados</b>	<b>42</b>
5.1 Pacotes de ondas localizados: propagação de partículas . . . . .	42
5.2 Um caso particular: influência das ressonâncias clássicas. . . . .	44
5.3 Caos e tunelamento . . . . .	50

5.3.1	Caso 1: $\epsilon = 0, 1$ ; $\omega = 2, 4$ . . . . .	53
5.3.2	Caso 2: $\epsilon = 0, 1$ ; $\omega = 2, 3$ . . . . .	54
5.3.3	Caso 3: $\epsilon = 0, 1$ ; $\omega = 4, 3$ . . . . .	55
5.3.4	Caso 4: $\epsilon = 0, 1$ ; $\omega = 0, 5$ . . . . .	56
5.3.5	Caso 5: $\epsilon = 0, 0$ ; dinâmica regular . . . . .	57
5.4	Dubletos de Tunelamento . . . . .	58
<b>6</b>	<b>Conclusões</b>	<b>63</b>



# Lista de Figuras

1.1	Poço duplo de potencial . . . . .	4
1.2	Estado fundamental e primeiro estado excitado do poço duplo da figura 1.1 . . . . .	5
1.3	Forma do potencial para diferentes valores de $t$ e parâmetros $V_0 = 1, \epsilon_0 = 0.25$ . . . . .	11
2.1	Potencial independente do tempo e seu diagrama de fase. . . . .	13
2.2	Mapas estroboscópicos do potencial dependente do tempo. Nesta figura podemos vislumbrar a grande variedade de comportamentos que o sistema pode exibir. Estes mapas correspondem a valores de $\epsilon$ e $\omega$ para os quais o tunelamento foi estudado. . . . .	16
2.3	Este mapa estroboscópico ilustra o comportamento do Hamiltoniano no limite de frequências altas. Vemos que ele se parece bastante com o diagrama de fase do caso independente do tempo (figura 2.1). . . . .	17
2.4	Esta sequência de mapas ilustra a suavidade das mudanças na dinâmica do sistema misto, apesar da forma brusca como parece variar como os parâmetros do Hamiltoniano. Vemos neste caso o processo de nascimento e o desenvolvimento de uma família de ilhas ressonantes. . . . .	19
2.5	Órbita de uma condição inicial caótica para 1500 períodos do Hamiltoniano. Vemos que uma única órbita caótica eventualmente preenche todo o mar de caos. . . . .	21
2.6	Mapas estroboscópicos e representações contínuas de algumas órbitas. Essa figura ilustra que nem sempre os mapas são suficientes para compreender a dinâmica. Nestes casos eles não deixam claro quais ilhas correspondem a movimento livre e quais a movimento confinado. . . . .	22

2.7	Algumas órbitas do segundo mapa da figura 2.2 e suas energias como função do tempo. O primeiro gráfico mostra uma órbita no limite de uma ilha regular e, os dois seguintes, órbitas da região caótica. Vemos que uma condição inicial caótica próxima de uma ilha regular permanece algum tempo na sua vizinhança. . . . .	24
3.1	Propagação de um pacote de ondas do tipo expressão (1.3) com $\hbar = 0,0144$ , $a = 0,12$ , $x_0 = -2,0$ e $p_0 = 2_0$ ( $E_0 = 2,0$ ) . . . . .	27
3.2	Propagação de um pacote de ondas inicialmente centrado em $(-0,928; 0,0)$ no potencial dependente do tempo com $\epsilon = 0,35$ , $\omega = 0,883$ . Nesta propagação vemos a mesma assimetria no afastamento máximo da barreira que pode ser observada na órbita clássica da condição inicial do centro do pacote (em azul no segundo gráfico da esquerda para a direita na figura 2.6). Assim como a partícula clássica o pacote ora é refletido ora é transmitido pela barreira. . . . .	37
4.1	Definição do transporte quântico: a integral da porção do pacote à direita do máximo da barreira em cada instante. . . . .	39
4.2	Esquema da representação clássica do pacote de ondas. Em vermelho estão os estados iniciais e em preto os estados em instantes posteriores. A cada ponto representado é associado um peso. No diagrama à esquerda nenhuma das condições iniciais ultrapassa a barreira no intervalo de tempo transcorrido. No diagrama à direita o transporte clássico é a soma dos pesos de todos os pontos que se vêem além de $x = 0$ . . . . .	40
5.1	Mapa estroboscópico para o intervalo $[0, 150]$ das órbitas com condições iniciais $(-1,98; 2,55)$ representada por quadrados, e $(-1,98; 2,75)$ , representada por estrelas. Vemos que a primeira, que pertence à camada caótica entre as ilhas, permanece confinada, enquanto a outra atravessa a barreira várias vezes. . . . .	46
5.2	Propagação de um pacote de ondas com centro em $(-1,98; 2,4)$ . O pacote comporta-se como se houvesse uma pequena barreira em torno de $x = -0,6$ . ESCALA: divisões maiores representam uma unidade, divisões menores representam 0,5 . . . . .	47
5.3	Mapa estroboscópico da condição inicial $(-1,081; 2,276)$ para oitenta períodos do Hamiltoniano, ou dez períodos da órbita periódica ressonante. Esta condição inicial pertence a uma das ilhas e vemos que a órbita passa sempre por algum elemento da família. . .	49
5.4	Curvas de transporte para um pacote centrado em $(-2,3; 0,0)$ com $a = 0,283$ , $\hbar = 0,26$ , $b = 0,943$ . . . . .	59

5.5	Curvas de transporte para um pacote de ondas com semi-larguras $a = 0,12$ , $b = 0,12$ , e $\hbar = 0,0144$ , condição inicial $(-2,3, 0,9)$ para $\epsilon = 0,1$ e $\omega = 2,3$ . . . . .	60
5.6	Curvas de transporte para um pacote centrado em $(-2,3;0,0)$ com $a = 0,283$ , $\hbar = 0,26$ , $b = 0,943$ . . . . .	61
5.7	O pacote largo em alguns instantes de tempo . . . . .	62

# Capítulo 1

## Introdução

Ao longo das duas últimas décadas a mecânica semiclássica de sistemas classicamente caóticos tem trazido à luz fenômenos quânticos interessantes e profundos com manifestações em diversas áreas da física. Um exemplo é o caráter universal identificado para o comportamento estatístico dos níveis de energia de sistemas quânticos com análogos clássicos caóticos, marcadamente distinto daquele para sistemas com análogo clássico regular. Outro exemplo é a observação de funções de onda que se acumulam no espaço de fase e também no espaço de coordenadas ao longo de órbitas periódicas do sistema caótico, fenômeno batizado de cicatrizes de órbitas periódicas [1].

As maiores dificuldades do limite semi-clássico surgem ao tratar fenômenos peculiares a apenas uma das teorias envolvidas, como o caos da mecânica clássica, ou o tunelamento da mecânica quântica. Na hierarquia que vai dos sistemas tipicamente clássicos, como o sistema solar, aos tipicamente quânticos, como o átomo de hidrogênio, há uma região para a qual se espera que tanto a descrição clássica quanto a quântica sejam fiéis e portanto é natural esperar que uma característica tão marcante da dinâmica clássica como o movimento caótico deixe traços na dinâmica quântica.

Comportamentos puramente regulares ou puramente caóticos são raras exceções na mecânica clássica. A imensa maioria dos sistemas apresentam um regime de movimento intermediário, com regiões caóticas e quasi-regulares coexistindo em seus espaços de fase, e são denominados sistemas mistos. O isolamento clássico destas regiões é completo, quanticamente no entanto há possibilidade de tunelamento entre elas, levando suas dinâmicas a influenciarem-se mutuamente e fazendo com que estes sistemas tenham suas próprias peculiaridades de comportamento e sejam considerados uma classe a parte. Um exemplo disto é que nos sistemas mistos as classes de universalidade características de caos ou regularidade das estatísticas de níveis não mais aparecem. Inicialmente propôs-se a

hipótese de que a estatística de níveis de energia destes sistemas resultasse da superposição de espectros não correlacionados associados cada um a uma região de movimento quasi-regular ou de caos do espaço de fase. No entanto muitas das simulações numéricas realizadas até hoje têm-se mostrado inconsistentes com esta previsão, e outras propostas têm sido apresentadas. Para maiores detalhes veja [2] e referências contidas.

Neste trabalho estudamos o problema de tunelamento na presença de caos, onde as peculiaridades das teorias quântica e clássica manifestam-se simultaneamente. Os sistemas mistos são ideais para este tipo de estudo pois podem conter regiões quasi-regulares classicamente isoladas, separadas por caos. Muitas vezes, modificando os parâmetros do Hamiltoniano de um sistema misto é possível aumentar ou diminuir o mar de caos entre as ilhas regulares, possibilitando a investigação da sua influência sobre o tunelamento. Em um sistema puramente caótico toda a superfície de energia é classicamente acessível a uma partícula, dificultando muito o estudo do tunelamento quântico.

Uma categoria particularmente interessante dos sistemas mistos, à qual pertence o modelo utilizado neste trabalho, é a daqueles que apresentam algum tipo de simetria discreta. Estes sistemas apresentam um mecanismo de tunelamento peculiar que será apresentado na seção a seguir. O estudo do tunelamento em sistemas mistos com simetria discreta levou à detecção de uma manifestação da influência do caos sobre a dinâmica quântica em regime profundamente quântico, isto é, longe do limite semiclássico, o fenômeno observado leva o nome de **tunelamento assistido por caos** e será abordado mais adiante.

O trabalho aqui apresentado é um estudo de tunelamento na presença de caos em um sistema classicamente misto, simétrico, **no regime semiclássico**. A maior parte dos trabalhos anteriores têm-se concentrado em fazer este estudo em regime profundamente quântico. Nosso potencial modelo é unidimensional, periodicamente dependente do tempo e obtido como perturbação de um potencial independente do tempo e integrável. Como veremos mais adiante, possui em geral duas ilhas de dinâmica quasi-regular separadas por um mar de caos. Estudamos o tunelamento de pacotes de onda localizados, entre essas ilhas, visando assim representar o movimento de partículas (esta característica receberá um sentido quantitativo mais preciso adiante nesta introdução, mas é o que significa estarmos trabalhando em regime semiclássico). Variando os parâmetros da perturbação dependente do tempo conseguimos alterar o tamanho das ilhas e a quantidade de caos que as separa. Estudamos também o tunelamento no caso integrável (não perturbado). Desta maneira, comparando os diversos casos pudemos observar claramente o favorecimento pelo caos do efeito de tunelamento. Detectamos o mecanismo de **tunelamento assistido por caos** atuando em nosso sistema através de algumas simulações complementares feitas em regime profundamente

quântico. Nossos resultados sugerem que o **tunelamento assistido por caos** se manifeste também no regime semi-clássico, embora de forma atenuada, e tenha sido o mecanismo acelerador do tunelamento no nosso caso.

## 1.1 Dubletos de Tunelamento

Vamos introduzir nesta seção um mecanismo de tunelamento peculiar a sistemas com simetria discreta, os **dubletos de tunelamento**. Na próxima seção trataremos da forma como este mecanismo pode ser fortemente influenciado, chegando a ser grandemente favorecido ou mesmo completamente anulado pela presença de caos no espaço de fase.

Primeiramente gostaríamos de observar que a identificação deste mecanismo veio juntamente com a introdução de um novo conceito de tunelamento, que surgiu a partir do estudo da dinâmica vibracional não linear de moléculas, mas que foi rapidamente reconhecido como um fenômeno de muita beleza e interesse, presente com frequência em sistemas multi-dimensionais: o **tunelamento dinâmico** [3].

Em um sistema com duas ou mais dimensões é possível que o espaço de fase divida-se em regiões isoladas mesmo na ausência total de uma barreira de potencial. Nestes casos o isolamento tem origem na dinâmica, e muitas vezes não pode ser previsto apenas a partir da inspeção da superfície de potencial (como no caso das barreiras), é preciso conhecer as trajetórias. Um exemplo famoso e simples é o bilhar anular, cuja borda são dois círculos, um externo e outro contido em seu interior. Mesmo quando os círculos não estão dispostos concentricamente, há órbitas que jamais tocam o círculo interno, colidindo apenas com o círculo externo, girando sempre no mesmo sentido. As órbitas desse tipo correspondentes a sentidos opostos de rotação ocupam regiões isoladas, simetricamente dispostas no eixo da ação no espaço de fase das coordenadas de ação e ângulo [4]. Inúmeros outros exemplos deste tipo de isolamento existem, como o potencial Nelson [5] e os potenciais moleculares do parágrafo anterior. O **tunelamento dinâmico** é o transporte quântico entre essas regiões, classicamente isoladas pela dinâmica apenas, sem que haja influência de uma barreira de potencial.

Para introduzir os dubletos de tunelamento utilizaremos um exemplo, o poço duplo de potencial ilustrado na figura 1.1, amplamente utilizado como modelo em estudos de tunelamento, inclusive neste trabalho. Este sistema apresenta no espaço de fase duas regiões isoladas entre si, povoadas por órbitas confinadas a um dos poços. Apesar de o exemplo conter uma barreira de potencial, os dubletos de tunelamento podem estar presentes independentemente da natureza do isolamento das regiões simetricamente dispostas no espaço de fase [3].

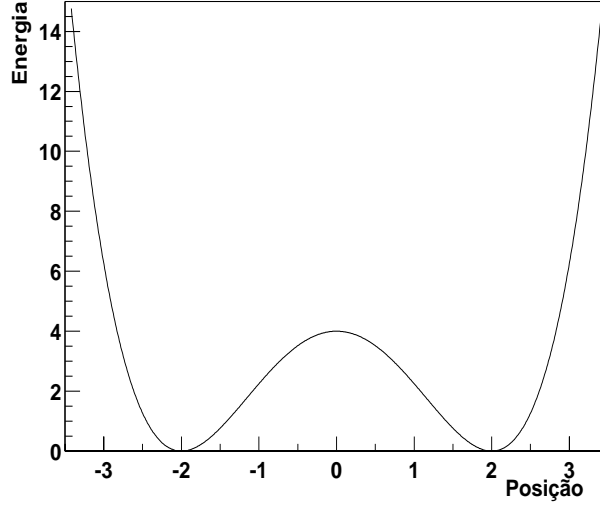


Figura 1.1: Poço duplo de potencial

Podemos começar imaginando um sistema composto por dois poços de potencial separados por uma barreira infinita. O estado fundamental deste sistema é a soma dos estados fundamentais de cada poço individualmente. Estes encontram-se totalmente isolados, pois são ambos nulos entre os poços, e por isso são independentes. A mudança de sinal de um deixa o outro inalterado, assim suas combinações lineares, par e ímpar, têm a mesma energia, e o estado fundamental do sistema completo é duplamente degenerado. Quando a barreira é finita, não há mais isolamento quântico total entre os dois poços embora ainda haja isolamento clássico. A interação entre as duas regiões quebra a degenerescência exata e faz com que os estados par ( $|E_p\rangle$ ) e ímpar ( $|E_i\rangle$ ) passem a formar um dubleto, sendo a energia  $E_i$  de  $|E_i\rangle$  ligeiramente superior à energia  $E_p$  de  $|E_p\rangle$ . As funções de onda dos estados do dubleto são bastante semelhantes às funções par e ímpar do estado fundamental do poço duplo com barreira infinita, de maneira que a sua soma e subtração dão origem a funções que estão, com boa aproximação, localizadas em lados opostos da barreira.

Se prepararmos um estado de tal maneira que no instante zero seja a soma do dubleto, e esteja portanto localizado no poço esquerdo, sua evolução temporal dar-se-á como descrito abaixo:

$$|f(0)\rangle = |E_+\rangle \equiv |E_p\rangle + |E_i\rangle$$

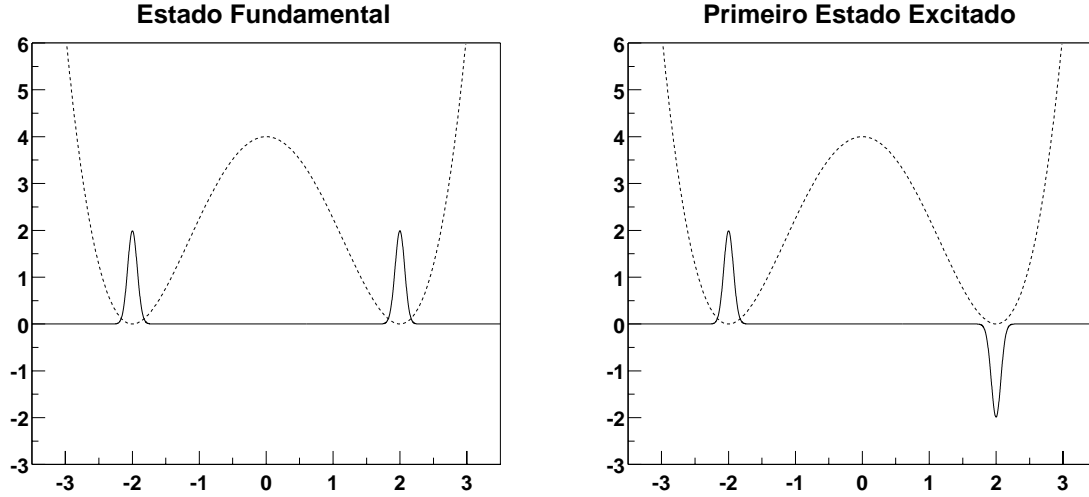


Figura 1.2: Estado fundamental e primeiro estado excitado do poço duplo da figura 1.1

$$|f(t)\rangle = \exp\left(-\frac{iE_p t}{\hbar}\right) \left( |E_p\rangle + \exp\left(\frac{-i(E_i - E_p)t}{\hbar}\right) |E_i\rangle \right)$$

$$|E_-\rangle \equiv |f(\frac{\pi\hbar}{E_i - E_p})\rangle = \exp\left(\frac{-iE_p\pi}{\hbar(E_i - E_p)}\right) (|E_p\rangle - |E_i\rangle)$$

Isto é, no tempo  $t = (\frac{\pi\hbar}{E_i - E_p})$  a fase relativa é  $\exp(-\frac{i(E_i - E_p)t}{\hbar}) = -1$  e o estado passa a ser a subtração do dubleto, ou seja, passa a estar localizado do lado oposto da barreira. Quando a fase toma o valor 1, no instante  $t = 2(\frac{\pi\hbar}{E_i - E_p})$ , o pacote volta à sua localização inicial. Esta oscilação coerente do pacote entre os dois poços é o tunelamento de um lado a outro da barreira e, como vemos acima, o período deste movimento é inversamente proporcional ao espaçamento do dubleto.

O desenvolvimento acima é aplicável sempre que um sistema apresente alguma simetria discreta, tenha no seu espaço de fase regiões classicamente isoladas relacionadas por essa simetria, e dubletos de estados quânticos do tipo simétrico e anti-simétrico não degenerados que se concentrem sobre essas regiões. Veremos sem demonstrar, que esta última condição não é uma limitação a mais, mas ocorre sempre que forem satisfeitas as primeiras duas.



Os toros existentes no espaço de fase de um sistema simétrico dividem-se em duas classes: os invariantes pela operação de simetria, e os que formam parte de pares congruentes relacionados pela simetria. Ou seja, quando um toro não é invariante há uma cópia exata sua situada em outro lugar do espaço de fase. Neste segundo caso, se existirem estados quânticos associados a esse par, a possibilidade de tunelamento entre as regiões quebra a degenerescência entre o par simétrico e anti-simétrico.

Quando em uma ilha de movimento regular há toros quantizados, é possível construir estruturas associadas a eles chamadas quasimodos. Estas são soluções aproximadas da equação de Schrödinger, localizadas sobre os toros. Os auto estados verdadeiros do sistema no entanto, são pares ou ímpares com relação à operação de simetria. É possível mostrar que existem pares de auto estados associados a pares de toros de simetria, construídos como soma e subtração dos quasimodos, formando dubletos. Assim, combinando os auto estados do dubleto como no caso do poço duplo, constroem-se estados localizados sobre um toro apenas que evoluem até eventualmente estarem localizados sobre o seu par de simetria, em seguida regressam, e assim por diante, em uma oscilação coerente, enquanto que trajetórias clássicas permanecem infinitamente confinadas ao toro original.

## 1.2 Tunelamento assistido por caos

As perturbações caóticas em geral tendem a aumentar a separação das energias do dubleto, diminuindo assim o tempo da oscilação coerente do estado quântico composto como sua superposição linear. Muitas vezes no entanto, observa-se em sistemas mistos uma forte dependência deste período com os parâmetros da perturbação, com variações de várias ordens de grandeza (ver por exemplo [4, 8]), e também com a proximidade entre os toros associados ao dubleto e a fronteira entre as ilhas regulares e o mar de caos. Estas características indicam que a influência do caos sobre o tunelamento se dá de forma bem mais complexa do que um mero afastamento do sistema da degenerescência.

Assim como no caso das órbitas regulares, também é possível associar estados quânticos a órbitas caóticas. A energia destes estados varia erratically com os parâmetros da perturbação, enquanto que os dubletos são pouco afetados. Quando um nível caótico aproxima-se muito de um dubleto, este deixa de comportar-se como um sistema isolado como no desenvolvimento da seção anterior, e o tunelamento passa a ser um problema de três níveis. Na seção anterior, os estados construídos como soma e subtração do dubleto ( $|E_+\rangle$  e  $|E_-\rangle$ ) encontravam-se acoplados como consequência da possibilidade de tunelamento entre eles. Neste caso, além do acoplamento direto, passa a existir também um

acoplamento indireto através do nível de energia caótico, isto é, o estado  $|E_+\rangle$  acopla-se ao nível caótico que por sua vez está acoplado a  $|E_-\rangle$  e vice-versa. Cálculos semiclássicos (por exemplo [6]) mostram que o acoplamento entre estados (que é a separação em energia do dubleto no caso de  $|E_+\rangle$  e  $|E_-\rangle$ ) decresce exponencialmente com a distância que os separa no espaço de fase. Os estados ( $|E_+\rangle$ ) e ( $|E_-\rangle$ ) localizam-se sobre toros (relacionados pela simetria) separados pelo mar de caos, enquanto níveis de energia caóticos são muito menos localizados e encontram-se bastante “espalhados” por toda a região de caos. Desta maneira, enquanto o acoplamento entre  $|E_+\rangle$  e  $|E_-\rangle$  é bastante pequeno, o estado caótico pode estar simultaneamente próximo a ambos, podendo estar mais fortemente acoplado a cada um deles. Frequentemente este acoplamento indireto é tão maior que o direto, que se torna a única contribuição significativa para o tunelamento. Podemos imaginar que, ao invés do tunelamento direto entre as duas regiões distantes, pequenas porções do pacote de ondas escapam sucessivamente para a região caótica, aonde o transporte até as proximidades da outra ilha é classicamente permitido e então tunelam para dentro [6]. Assim, o mar de caos reduz o isolamento entre as regiões. A proximidade no espaço de fase entre os estados de um dubleto e um nível de energia caótico reflete a facilidade do escape para o mar de caos.

Assim, a presença de caos no espaço de fase entre duas regiões disjuntas relacionadas por simetria, pode favorecer grandemente o tunelamento entre elas. Este efeito no entanto está sujeito a que haja grande aproximação de um nível de energia caótico, por isto depende de forma tão complicada dos parâmetros do hamiltoniano como a posição destes no espectro de energias. Além disto, uma vez que o acoplamento entre dois níveis depende com uma exponencial negativa da sua separação no espaço de fase, um dubleto pode ser tão mais afetado pela aproximação de um nível caótico quanto mais próximo ao mar de caos estiver localizado, isto é, níveis de energia mais próximos à fronteira das ilhas regulares são mais afetados, e os mais internos menos afetados. Estas duas características do efeito de **tunelamento assistido por caos** foram observadas de maneira bastante forte no sistema do bilhar anular, e registradas em [4].

Uma discussão muito ilustrativa dos mecanismos de tunelamento de dois e três níveis pode ser encontrada em [6]

### 1.3 Sistemas periodicamente dependentes do tempo

Toda a argumentação acima parece ser válida apenas para sistemas independentes do tempo, já que faz uso do conceito de auto estados, inexistentes em

sistemas não conservativos. Para sistemas periodicamente dependentes do tempo no entanto, existe uma classe de estados análogos aos auto estados dos sistemas conservativos no sentido de terem uma dependência temporal simples, e de constituírem uma base para o sistema. Estes são os estados de Floquet [7], que serão introduzidos no capítulo 3. Adiantamos apenas que aos estados de Floquet são associadas quasi-energias de uma forma que ficará clara mais adiante. Foram observados efeitos dramáticos de tunelamento na presença de caos em um poço duplo de potencial quártico com perturbação periodicamente dependente do tempo [8, 9]. Lin e Ballentine [8] observaram a oscilação coerente de um pacote de ondas gaussiano entre ilhas de regularidade classicamente isoladas e relacionadas por simetria, para uma escolha específica dos parâmetros da perturbação. Mediram o período desta oscilação, que resultou ser várias ordens de grandeza inferior à estimativa feita para a oscilação coerente do mesmo pacote no sistema não perturbado. Posteriormente este efeito foi explicado em termos da existência de dubletos formados por estados de Floquet (quasi-energias muito próximas) simétricos e anti-simétricos, localizados sobre as ilhas de regularidade [10]. Plata e Llorente [10] verificaram que o estado utilizado em [8] era essencialmente composto a partir do dubleto de energia mais baixa, e encontraram sua separação. Calcularam o tempo de oscilação coerente entre as ilhas para um estado composto por este dubleto e o resultado revelou-se totalmente compatível com o observado por Lin e Ballentine [8].

Além da estrutura de dubletos associados a pares simétricos de ilhas regulares, existem também estados de Floquet associados a trajetórias caóticas. O comportamento das quasi-energias em função da variação dos parâmetros da perturbação neste caso é qualitativamente semelhante ao dos sistemas conservativos. Os dubletos permanecem aproximadamente estáticos enquanto os “estados caóticos” variam erráticamente sua posição no espectro, algumas vezes aproximando-se demais dos dubletos, transformando o tunelamento em um problema de três níveis. O forte acoplamento indireto dos estados do dubleto de Floquet através dos “estados caóticos” pode levar a uma diminuição do período da oscilação coerente entre as ilhas opostas [11]. Desta maneira, fica comprovado um mecanismo de tunelamento assistido por caos para sistemas periodicamente dependentes do tempo totalmente análogo àquele dos sistemas conservativos.

Outro efeito digno de nota é a supressão total do tunelamento observado por F. Grossmann, T. Dittrich, P.Jung e P. Hänggi [9]. Este efeito está associado às raras ocasiões em que a perturbação reduz a zero a separação do dubleto, tornando o tempo de oscilação coerente do pacote de ondas infinito.

## 1.4 Observações experimentais do tunelamento assistido por caos e do tunelamento dinâmico

As últimas duas décadas viram rápidos avanços teóricos e uma série de verificações numéricas do tunelamento dinâmico, enquanto a área irmã de tunelamento assistido por caos tem experimentado a mesma efervescência nos últimos dez anos. No entanto, os sucessos na observação experimental destes dois fenômenos começaram há pouco mais do que três anos.

A primeira observação do tunelamento assistido por caos foi feita no ano de 2000, utilizando a analogia ótica da mecânica quântica. O sistema utilizado foi uma cavidade de micro ondas super condutora com a forma de um bilhar anular como aquele em [4]. Foram identificadas nos modos normais distribuições de quasidubletos fracamente acoplados aos níveis da região caótica, que serviram como evidência de tunelamento entre toros do tipo “whispering gallery” [12].

O tunelamento dinâmico foi diretamente observado usando átomos ultra frios, de maneira quase simultânea por dois grupos [13, 14]. Um deles [13], liderado por W.K.Hesinger, sujeitou um condensado de Bose-Einstein a um potencial de pêndulo periodicamente forçado obtido com uma onda estacionária de luz periodicamente modulada. Classicamente, o espaço de fase deste sistema apresenta, para os parâmetros escolhidos pelo grupo experimental, duas ilhas regulares simetricamente dispostas no eixo de momento associadas a uma ressonância de primeira ordem com a perturbação. Para iniciar o movimento de oscilação dos átomos do condensado em um sentido preferencial (o que equivale a escolher uma das ilhas regulares simetricamente dispostas), o potencial é deslocado adiabaticamente. Fazendo medidas em instantes equivalentes do ciclo do movimento, ou seja, espaçados de múltiplos do período da perturbação e do movimento ressonante (de ordem 1), o resultado classicamente esperado seria detectar todos os átomos movendo-se no sentido original. No entanto, em algumas medidas, a maior parte dos átomos foram encontrados movendo-se no sentido oposto, ou seja, com uma diferença fase de  $\pi$  com relação ao movimento clássico. Isto equivale a dizer ter havido uma migração entre as ilhas regulares ressonantes relacionadas por simetria.

## 1.5 Objetivos Deste Trabalho

Nossa proposta neste trabalho foi estudar a influência do caos sobre o tunelamento de uma partícula. Uma das maiores diferenças com relação aos estudos teóricos anteriores é que utilizamos estados quânticos muito mais localizados, ou seja, compostos por bem mais estados do que apenas um dubleto. Localizar o pacote

é equivalente a escolher  $\hbar$  relativamente pequeno mas não desprezível em relação às áreas relevantes no espaço de fase (por exemplo, às áreas das ilhas regulares), já que nosso pacote é de incerteza mínima. Isto corresponde ao regime semi-clássico para um problema deste tipo. Em um estado localizado não esperávamos identificar o tunelamento assistido por caos atuando de maneira clara, já que a dinâmica da função de onda é determinada por um jogo complicado de dubletos cujos respectivos  $|E_+\rangle$  e  $|E_-\rangle$  podem estar sendo mais fortemente acoplados ou menos em função dos parâmetros da perturbação.

Utilizamos como modelo um potencial anarmônico unidimensional perturbado por um termo periodicamente dependente do tempo. O potencial foi escolhido como uma função par, quártica, com um termo quadrático negativo, de forma a apresentar uma barreira entre dois mínimos locais. Este oscilador é não integrável em sua representação clássica e seu espaço de fase apresenta regiões caóticas e regulares. Mais especificamente definimos:

$$V(x, t) = \frac{x^4}{4} - 2V_o(1 + \epsilon \cos(\omega t))x^2 + 4V_o^2(1 + \epsilon \cos(\omega t))^2 \quad (1.1)$$

A escolha particular da forma da dependência temporal foi feita para manter o potencial sempre par com o ponto de máximo local sempre em  $x = 0$ , e a oscilação afetando bastante o topo da barreira. Neste trabalho tomamos  $V_o = 1$  e variamos apenas  $\epsilon$  (amplitude da oscilação),  $\omega$  (frequência angular da oscilação) e  $\hbar$ . A massa da partícula pode ser considerada igual a 1 (um) sem perda de generalidade.

A figura 1.3 mostra o potencial  $V(x, t)$  para alguns valores fixos de  $t$ , ilustrando como ocorre a sua dependência temporal. Além da oscilação da barreira há também o deslocamento dos pontos de mínimo local ao longo do eixo. Veremos adiante que as regiões caóticas concentram-se geralmente próximas ao topo da barreira, o que torna o potencial bastante propício para o estudo de tunelamento caótico. O caso  $\epsilon = 0$  corresponde a um potencial estático e dá origem a um Hamiltoniano conservativo. Em uma dimensão, uma constante de movimento é suficiente para garantir a integrabilidade e por isto o caso  $\epsilon = 0$  é integrável.

Nosso estudo de tunelamento na presença de caos foi feito através da simulação numérica da evolução temporal de pacotes de ondas no potencial. Pensávamos inicialmente fazer uma comparação direta entre o tunelamento medido para diferentes valores não nulos de  $\epsilon$  e  $\omega$  e o tunelamento para  $\epsilon = 0$ . Acreditávamos que assim seria possível isolar a influência do caos sobre o tunelamento. Percebemos no entanto que os sistemas regular ( $\epsilon = 0$ ) e misto ( $\epsilon \neq 0$ ) são por demais diferentes para permitir esse tipo de comparação direta. O professor Alfredo Osório de Almeida, do Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF), nos chamou a atenção para a importância de conhecer a porção do pacote que atinge o outro

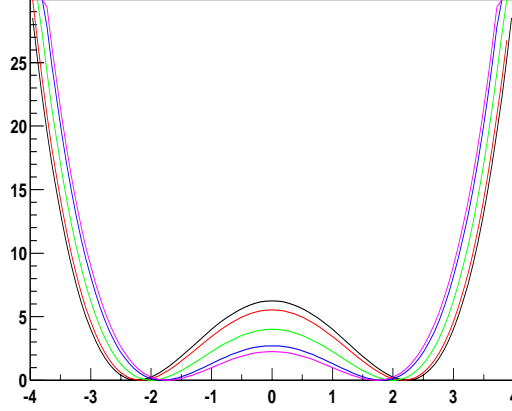


Figura 1.3: Forma do potencial para diferentes valores de  $t$  e parâmetros  $V_0 = 1, \epsilon_0 = 0.25$

lado da barreira apenas através do ganho de energia no sistema não conservativo, e o professor Caio Lewenkopf, da Universidade Estadual do Rio de Janeiro (UERJ), nos sugeriu a forma de realizar esse cálculo. A comparação entre o transporte quântico total e o transporte classicamente permitido do pacote de ondas revelou-se a mais interessante para este problema.

Houve várias etapas em nosso estudo do tunelamento caótico. A primeira foi analisar a dinâmica clássica e identificar as regiões de parâmetros ( $\epsilon$  e  $\omega$ ) adequadas para ilustrar o problema de interesse. Em seguida, estudamos o problema quântico com  $\epsilon = 0$ ,

$$V(x) = \frac{x^4}{4} - 2x^2 + 4 \quad (1.2)$$

pois queríamos inicialmente que servisse como modelo de tunelamento na ausência de caos, mas também como o primeiro passo para conhecer o comportamento do sistema quântico. Passamos depois ao cálculo da propagação de pacotes de ondas no potencial dependente do tempo. Esta foi a etapa que apresentou maiores dificuldades numéricas. Tentamos três vias diferentes antes de obtermos sucesso. Por último, realizamos o cálculo do transporte clássico dos pacotes de ondas que será descrito mais adiante.

Utilizamos sempre como estado inicial pacotes gaussianos normalizados de mínima incerteza, com a forma

$$f(x, 0) = \pi^{-\frac{1}{4}} a^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{-(x - x_0)^2}{2a^2} + \frac{ip_0 x}{\hbar} + \frac{-ip_0 x_0}{2\hbar}\right) \quad (1.3)$$

onde  $x_0$  e  $p_0$  são a posição e momento do centro do pacote. As incertezas em  $x$  e em  $p$  são dadas por:

$$\Delta x = \frac{a}{\sqrt{2}} \quad \Delta p = \frac{\hbar}{a\sqrt{2}}$$

Estes são estados coerentes do oscilador harmônico mas, ao propagarem em um potencial quártico espalham, e o pacote eventualmente, através de múltiplas reflexões nas paredes do potencial, perde a coesão, tendendo a distribuir-se uniformemente por toda a extensão do poço duplo.

Como nosso potencial é par, escolhemos lançar pacotes sempre do lado esquerdo do eixo de simetria. Nossas simulações foram feitas propagando pacotes de ondas localizados dentro de ilhas regulares, variando a proximidade do centro do pacote com a região de caos. Fizemos isto para alguns valores fixos de  $\epsilon$  e  $\omega$ , e em seguida começamos a investigar a dependência do tunelamento com a largura do pacote.

No capítulo 2 descrevemos qualitativamente a dinâmica clássica do poço duplo de potencial nos casos independente e dependente do tempo. Em seguida, no capítulo 3, abordamos a dinâmica quântica e os métodos numéricos estudados para o cálculo da propagação do pacote de ondas no potencial dependente do tempo. O capítulo 4 é dedicado ao comentário de algumas peculiaridades do tunelamento de pacotes de ondas e à definição das grandezas de interesse dos resultados. No capítulo 5 apresentamos os resultados, comentários e interpretações. Finalmente, no capítulo 6 resumimos as conclusões do trabalho.

## Capítulo 2

### A Dinâmica Clássica

Vamos começar o estudo da dinâmica clássica do nosso modelo por uma breve descrição do caso não forçado,  $\epsilon = 0$ . Este caso é independente do tempo e integrável.

$$V(x) = \frac{x^4}{4} - 2V_0x^2 + 4V_0^2$$

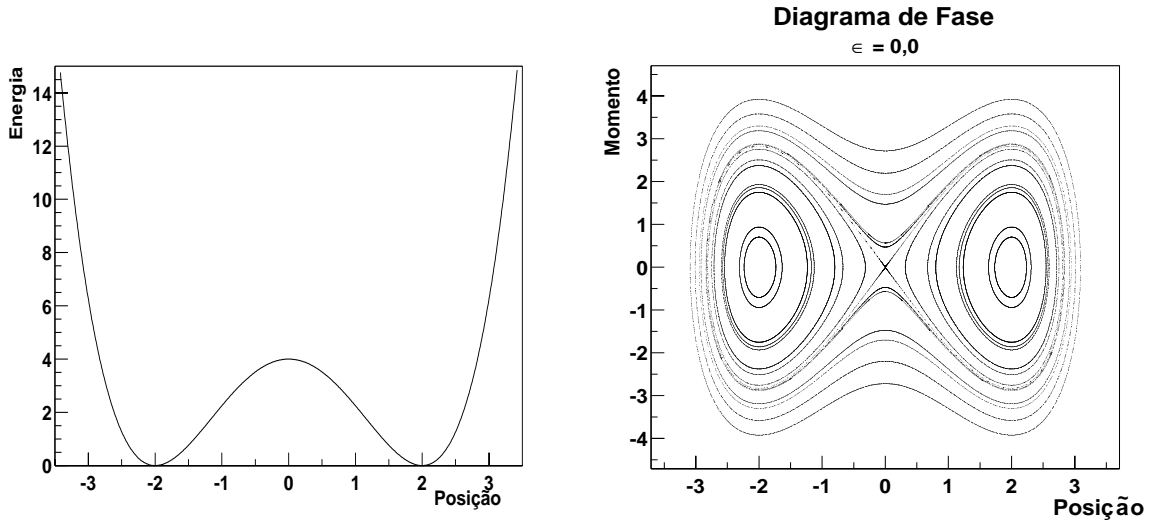


Figura 2.1: Potencial independente do tempo e seu diagrama de fase.

O potencial  $V(x)$  tem três pontos de equilíbrio: dois estáveis, no fundo de cada poço e um instável no topo da barreira. Como vemos no seu diagrama de fase, figura 2.1, há duas regiões isoladas entre si por uma separatriz. Cada uma delas corresponde a movimento confinado em um dos poços. A separatriz é composta



por três órbitas, o ponto de equilíbrio instável,  $x = 0, p = 0$ , e os dois laços. Estes correspondem ao movimento de uma partícula lançada com energia igual à do máximo local, de uma posição qualquer diferente de  $x = 0$ . São órbitas abertas, que requerem tempo infinito para serem percorridas:  $|p| \rightarrow 0$  para  $|t| \rightarrow \infty$ . Se escolhermos o sentido crescente para o tempo, o laço da esquerda é percorrido em sentido horário enquanto que o da direita é percorrido em sentido anti-horário e para  $t \rightarrow \infty, p \rightarrow 0$  por valores positivos. Se invertermos o sentido do tempo os sentidos de percurso invertem-se e temos para  $t \rightarrow -\infty, p \rightarrow 0$  por valores negativos. Cada um destes laços é a junção suave de uma variedade estável e uma instável. Além da separatriz estão as órbitas de partículas com energias superiores à da barreira e que a cruzam livremente.

## 2.1 A Dinâmica Clássica com Potencial Dependente do Tempo

No caso  $\epsilon \neq 0$ , o Hamiltoniano tem unicidade de solução apenas no espaço de fase estendido, que inclui o tempo como coordenada. Por isto seu diagrama de fase é tridimensional. É conveniente no entanto ter uma representação bidimensional da dinâmica, por isto utilizamos o recurso dos mapas estroboscópicos. Estes são obtidos propagando um reticulado de condições iniciais no espaço de fase  $(x, p)$  e registrando seu estado em múltiplos do período  $T$  do Hamiltoniano. Sempre para um instante  $t$  fixo, temos o Hamiltoniano função apenas de  $x$  e  $p$ ,  $H_t(x, p)$ . Visto que  $H_{nT}(x, p)$  é a mesma função para qualquer  $n$  inteiro, todos os resultados podem ser sobrepostos em um único plano de fase  $(x, p)$ .

Uma propriedade importante dos sistemas unidimensionais periodicamente dependentes do tempo é que são análogos a uma classe de sistemas bidimensionais independentes do tempo, como verificamos a seguir.

Seja  $H$  um Hamiltoniano tal que:

$$H(x, p, t) = H(x, p, t + T)$$

suas equações de movimento são:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial x} \end{aligned}$$

Seja  $F$  um Hamiltoniano de dois graus de liberdade  $(x, p, \theta, t)$ , com a forma:

$$F(x, p, \theta, I) = H(x, p, \frac{\theta}{\omega}) + \omega I$$

suas equações de movimento são:

$$\dot{x} = \frac{\partial F}{\partial p} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (1)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial F}{\partial x} = -\frac{\partial H}{\partial x} \quad (2)$$

$$\dot{\theta} = \frac{\partial F}{\partial I} = \omega \rightarrow \theta = \omega t \quad (3)$$

$$\dot{I} = -\frac{\partial F}{\partial \theta} \quad (4)$$

onde  $\omega = \frac{2\pi}{T}$  é constante. A terceira das equações acima nos dá  $\theta = \omega t$ , portanto (1) e (2) são exatamente as equações de movimento de  $H$ . A última equação fica

$$\dot{I} = -\frac{\partial F}{\partial \theta} = -\frac{1}{\omega} \frac{\partial H(x, p, t)}{\partial t} = -\frac{1}{\omega} \frac{dE}{dt}$$

isto é,

$$\omega I = -E$$

O sistema  $H(x, p, t)$  periódico no tempo pode ser visto como um sistema de dois graus de liberdade onde  $(-E)$  e  $t$  formam o segundo par de variáveis canônicas. O mapa estroboscópico de  $H$  é exatamente o mapa de Poincaré de  $F$  para  $\theta = 0$ .

### 2.1.1 Mapas Estroboscópicos

A figura 2.2 mostra exemplos de mapas estroboscópicos deste potencial que correspondem a valores de  $\epsilon$  e  $\omega$  para os quais serão apresentados resultados de tunelamento. O termo dependente do tempo tem o efeito de destruir a separatriz e criar em seu lugar uma região de caos. Próximo a cada um dos antigos pontos de equilíbrio estável há em geral uma região de movimento predominantemente regular chamada ilha não ressonante, porque existe para uma faixa larga de frequências; algumas vezes vamos designá-la também por ilha principal. À medida em que a perturbação é aumentada, os toros mais externos às ilhas não ressonantes são destruídos, e o espaço de fase é cada vez mais tomado por caos. Em alguns casos, o movimento caótico chega a dominar completamente a região relevante do espaço de fase.

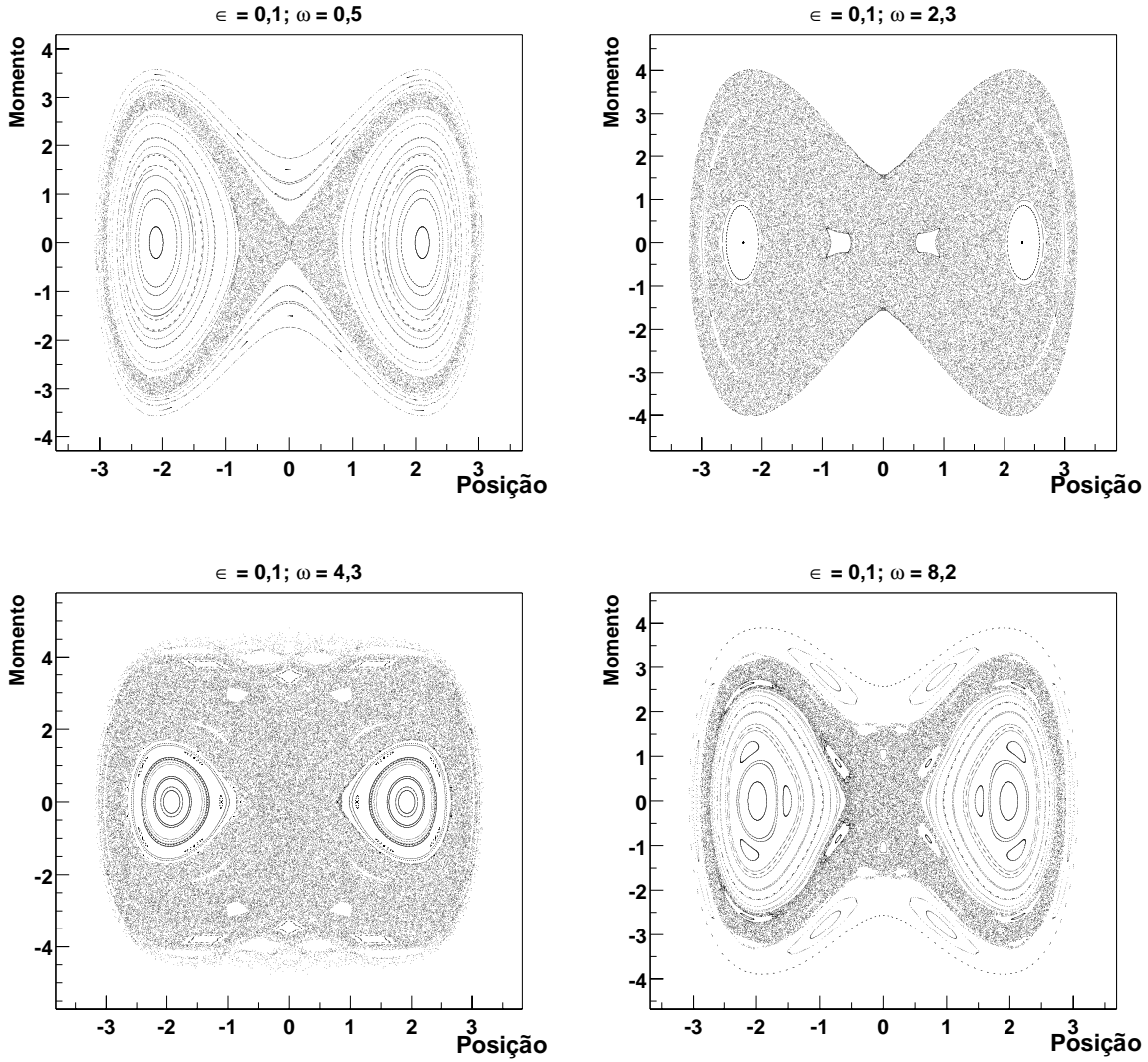


Figura 2.2: Mapas estroboscópicos do potencial dependente do tempo. Nesta figura podemos vislumbrar a grande variedade de comportamentos que o sistema pode exibir. Estes mapas correspondem a valores de  $\epsilon$  e  $\omega$  para os quais o tunelamento foi estudado.

Os mapas da figura 2.2 foram todos gerados para  $\epsilon = 0,1$ , com a frequência variando de maneira crescente. Do primeiro para o segundo mapa,  $\omega = 0,5$  e  $\omega = 2,3$  respectivamente, vemos a diminuição do tamanho das ilhas não ressonantes e o aumento da região de caos, como foi comentado. No entanto, nos dois mapas seguintes vemos que as ilhas tornam a aumentar. Isto pode ser compre-

dido de maneira simples imaginando que, para frequências muito altas, a barreira oscila tantas vezes durante o percurso da partícula que esta acaba por comportar-se como se estivesse sujeita a um potencial médio fixo, e o sistema aproxima-se do comportamento integrável. A figura 2.3 ilustra esta observação; ela mostra um mapa estroboscópico feito para  $\epsilon = 0,1$  e  $\omega = 16,0$ , vemos que é bastante semelhante ao diagrama de fase do caso não forçado, embora a perturbação ainda se manifeste nos toros segmentados que vemos como linhas pontilhadas e na fina faixa de caos que substitui a separatriz. Em uma versão deste mapa estroboscópico mais densamente povoada de condições iniciais, não exibida aqui, é possível ver também cadeias de pequenas ilhas entre os toros integráveis. Assim, como neste caso, para cada  $\epsilon$  fixo há um ponto a partir do qual incrementos na frequência passam a ter o efeito de diminuir a perturbação.

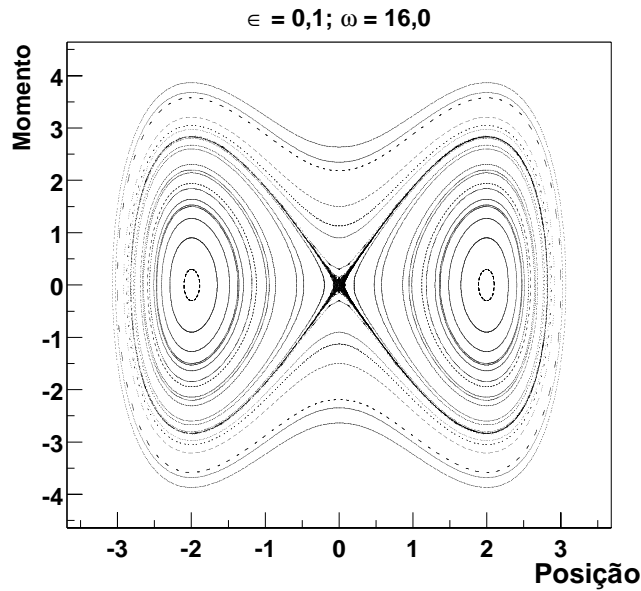


Figura 2.3: Este mapa estroboscópico ilustra o comportamento do Hamiltoniano no limite de frequências altas. Vemos que ele se parece bastante com o diagrama de fase do caso independente do tempo (figura 2.1).

Além das ilhas associadas aos pontos de equilíbrio, que existem para uma faixa larga de parâmetros do Hamiltoniano, há outras que aparecem devido a ressonâncias entre a oscilação do Hamiltoniano e o movimento das partículas, batizadas de ilhas ressonantes [15], que são extremamente sensíveis às mudanças na amplitude e na frequência da oscilação. Elas podem ser vistas em todos os mapas com exceção de  $(\epsilon = 0,1; \omega = 0,5)$  e  $(\epsilon = 0,1; \omega = 16,0)$ . Isto no entanto

não quer dizer que não existam nestes dois casos. Podem ser pequenas demais para serem vistas ou mesmo pequenas demais para serem detectadas dentro do limite de precisão do integrador numérico. Ou podem simplesmente ter escapado à malha de condições iniciais. Como uma observação empírica, podemos dizer que as ilhas ressonantes são mais comuns para altas frequências, já que pequenos períodos favorecem ressonâncias.

No centro de cada ilha regular, ressonante ou não, há uma órbita periódica, que pode ser vista no mapa estroboscópico (quando se acerta a condição inicial) como um ponto ou, quando a ordem da ressonância é maior do que um, como um conjunto discreto de pontos, cada um no centro de uma ilha. As demais curvas fechadas são seções de cilindros topológicos no espaço de fase estendido sobre os quais as órbitas regulares são confinadas.

As ilhas ressonantes aparecem em famílias, com número de elementos igual à ordem da ressonância. Elas são geradas pelas mesmas órbitas e representam seções diferentes de um mesmo cilindro topológico. Na figura 2.4 vemos o nascimento e o desenvolvimento de duas famílias simétricas destas ilhas, cada uma com dois elementos (associadas portanto a uma ressonância de ordem dois). É interessante ter a comprovação visual de que mesmo em um sistema cujo comportamento muda de maneira aparentemente aleatória, e tão bruscamente com os parâmetros, as modificações têm lugar de maneira suave. Podemos pensar a sequência de mapas exibida nesta figura como tendo início com o terceiro mapa da figura 2.2, que corresponde a  $\omega = 4,3$ , e finalizando com o último mapa da mesma figura, que corresponde a  $\omega = 8,2$ . No primeiro, o nascimento das ilhas pode ser visto como quatro estreitas rarefações no mar de caos, em torno das ilhas não ressonantes. Na figura 2.4 vemos como elas gradualmente ganham definição e tamanho e vão preenchendo o espaço que as separa das ilhas não ressonantes. No terceiro mapa desta figura, vemos que os pontos da região caótica entre as ilhas começam a agrupar-se em torno de curvas, indicando que as órbitas concentram-se em cascas cilíndricas cada vez mais finas, até que no quarto mapa, as ilhas fundem-se à não ressonante, e no quinto mapa, os dois pontos fixos de segunda ordem se fundem em único ponto fixo de primeira ordem. No quinto mapa, vemos também o nascimento de um novo par de famílias simétricas, desta vez com três elementos, que também se fundem à ilha principal dando origem à ressonância de terceira ordem de  $\epsilon = 0,1$   $\omega = 8,2$ . Olhando com atenção o mapa  $\epsilon = 0,1$ ,  $\omega = 7,5$  (último mapa da figura 2.4) vemos também os indícios do surgimento da ressonância de ordem quatro que aparece como uma família bem definida em  $\epsilon = 0,1$   $\omega = 8,2$ . A presença desta família nas proximidades das fronteiras entre as ilhas não ressonantes e o caos terá um efeito marcante sobre os resultados, como veremos mais adiante.

Apesar de muito úteis, apenas os mapas estroboscópicos não são suficientes

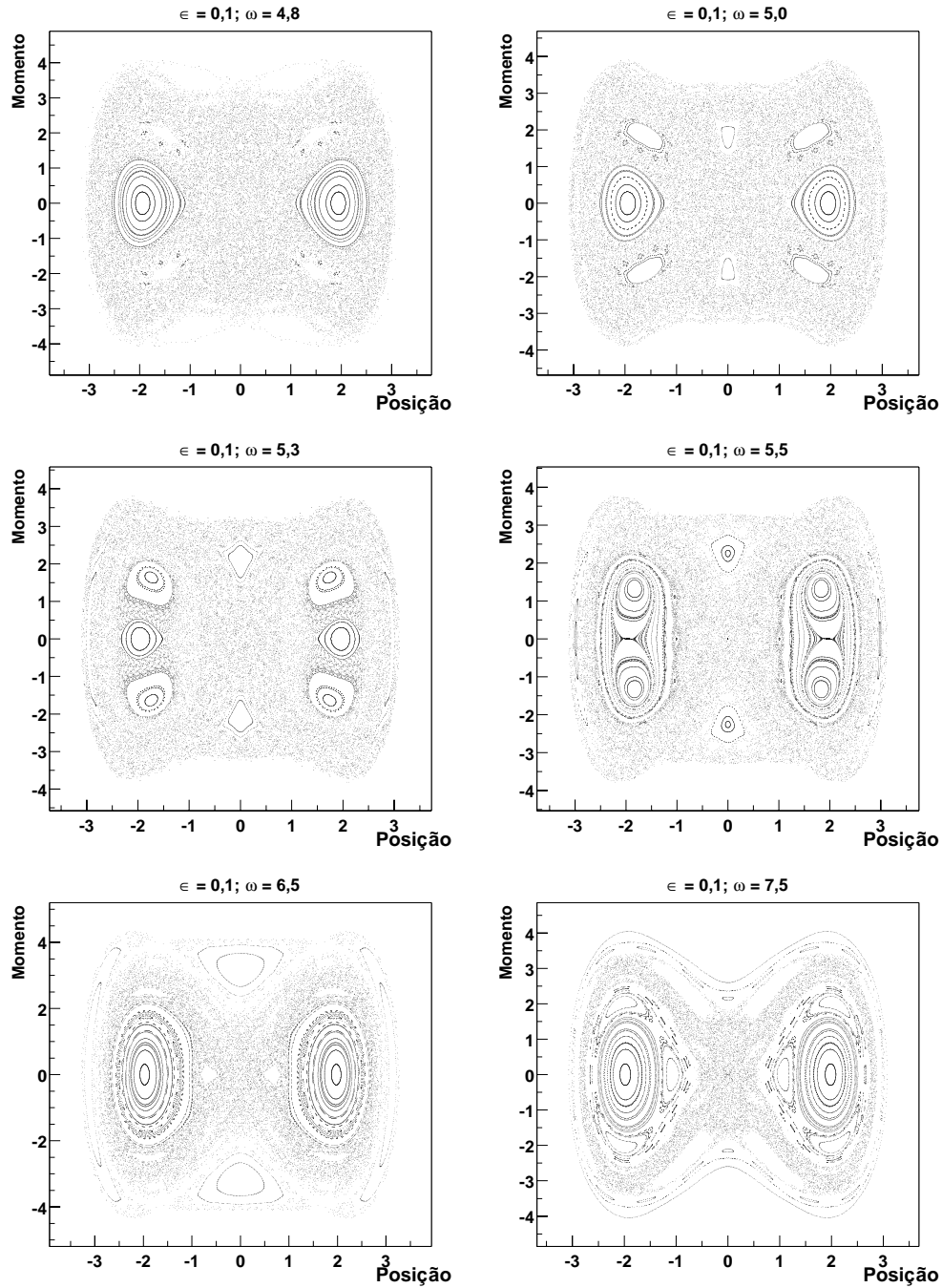


Figura 2.4: Esta sequência de mapas ilustra a suavidade das mudanças na dinâmica do sistema misto, apesar da forma brusca como parece variar como os parâmetros do Hamiltoniano. Vemos neste caso o processo de nascimento e o desenvolvimento de uma família de ilhas ressonantes.

para conhecer a dinâmica. Eles representam o sistema em um conjunto discreto de instantes. Através deles é possível identificar as condições iniciais para as quais o movimento é caótico e aquelas para as quais o movimento é regular. Não é possível no entanto conhecer as trajetórias.

### 2.1.2 Órbitas

Estamos particularmente interessados em saber se uma trajetória é ou não confinada a um dos poços. Desejamos medir o tunelamento de pacotes de ondas através da barreira, e ao fazer isso, é preciso garantir que o pacote esteja centrado em condições iniciais correspondentes a órbitas classicamente confinadas. Caso contrário, ao invés de tunelamento estaríamos medindo transporte classicamente permitido e regular do pacote de ondas.

As órbitas do sistema dependente do tempo, como mencionado anteriormente, desenvolvem-se em um espaço de três dimensões  $(x, p, t)$ , por isto utilizamos como representação suas projeções no plano  $(x, p)$ . A figura 2.6 mostra dois mapas, gerados para  $\epsilon = 0,35$ , com  $\omega = 0,883$  e  $\omega = 7,45$  respectivamente, e algumas órbitas correspondentes. Vemos no mapa  $\epsilon = 0,35; \omega = 0,883$  três ilhas de cada lado da barreira. A órbita em vermelho corresponde à condição inicial  $(x = -1,795, p = 0,0)$ , e a órbita em verde corresponde à condição inicial simétrica  $(x = 1,795, p = 0,0)$ , que são os pontos no centro das ilhas do meio de cada poço, como indicado no mapa. Com esta representação contínua no tempo do movimento vemos que as condições iniciais contidas nas ilhas centrais visitam também a região do espaço de fase que, em múltiplos do período do hamiltoniano, é ocupada pelas ilhas mais externas, mas são confinadas pela barreira. Por sua vez, as órbitas centrais das ilhas mais próximas do centro do potencial mostram que estas ilhas são criadas por trajetórias que são alternadamente transmitidas e refletidas pela barreira. É interessante notar a assimetria entre o afastamento máximo alcançado de cada lado por esta órbita. Veremos mais tarde que isto se reflete na propagação do pacote de ondas quântico.

O mapa  $\epsilon = 0,35; \omega = 7,45$  mostra dez ilhas ressonantes claramente delimitadas no mapa estroboscópico, três de cada lado do poço, dispostas ao redor da ilha não ressonante, duas centradas em  $x = 0$  simetricamente dispostas no eixo do momento, e duas bastante alongadas simetricamente dispostas no eixo da posição. Na figura ao lado vemos em azul a órbita da condição inicial  $x = 0,0, p = 4,32$  (meio da ilha superior centrada em  $x = 0$ ), e em vermelho a órbita da condição inicial  $x = -0,98, p = 0,0$ , localizada no centro de uma das três ilhas ressonantes contidas no poço esquerdo, a mais próxima de  $x = 0$ . Vemos que cada uma destas duas órbitas têm origem no centro de uma ilha, mas atravessam também o centro de outras ilhas. A órbita em azul atravessa o centro das quatro ilhas

mais externas e a órbita em vermelho atravessa o centro das três ilhas em torno da ilha não ressonante. Verificamos que podemos obter as órbitas representadas escolhendo como condição inicial o centro de qualquer das ilhas por elas atravessadas. Assim, vemos que as dez ilhas ressonantes mencionadas dividem-se em três famílias, uma formada pelas quatro mais externas e duas outras formadas pelos dois conjuntos de três ilhas dispostas em torno das ilhas não ressonantes de cada lado da barreira. As ilhas de cada família são formadas pelas mesmas órbitas, são seções do mesmo cilindro que “serpenteia” pelo espaço de fase estendido, sendo flagrado em diferentes posições. As famílias de ilhas aparecem quando a órbita periódica à qual estão associadas (que é a órbita dos seus centros) é fruto de uma ressonância de ordem superior a um. Assim, essa órbita precisa de mais de um período do hamiltoniano para voltar ao mesmo ponto e o mapa estroboscópico flagra-a em diferentes posições do espaço de fase.

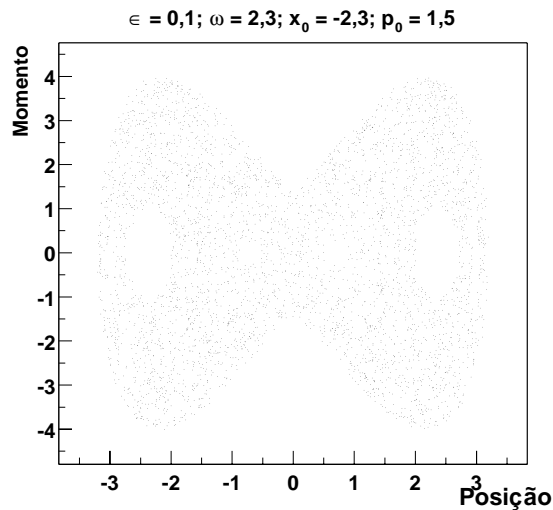


Figura 2.5: Órbita de uma condição inicial caótica para 1500 períodos do Hamiltoniano. Vemos que uma única órbita caótica eventualmente preenche todo o mar de caos.

Na figura 2.5 vemos o mapa estroboscópico de uma única órbita caótica no potencial com  $\epsilon = 0,1$   $\omega = 2,3$  para  $x_0 = -2,3$ ;  $p_0 = 1,5$ ,  $0 < t < 1500$ . Ela preenche uniformemente a região de caos do espaço de fase. Este é o comportamento geral das órbitas caóticas; no entanto, a transição das órbitas regulares, que em múltiplos de  $T$  encontram-se sempre sobre uma curva, e as caóticas, que mesmo em múltiplos de  $T$  erram por uma região extensa do espaço de fase, não pode ser totalmente brusca. A figura 2.7 mostra que órbitas caóticas com condições iniciais bastante próximas de ilhas regulares circundam-nas por algum



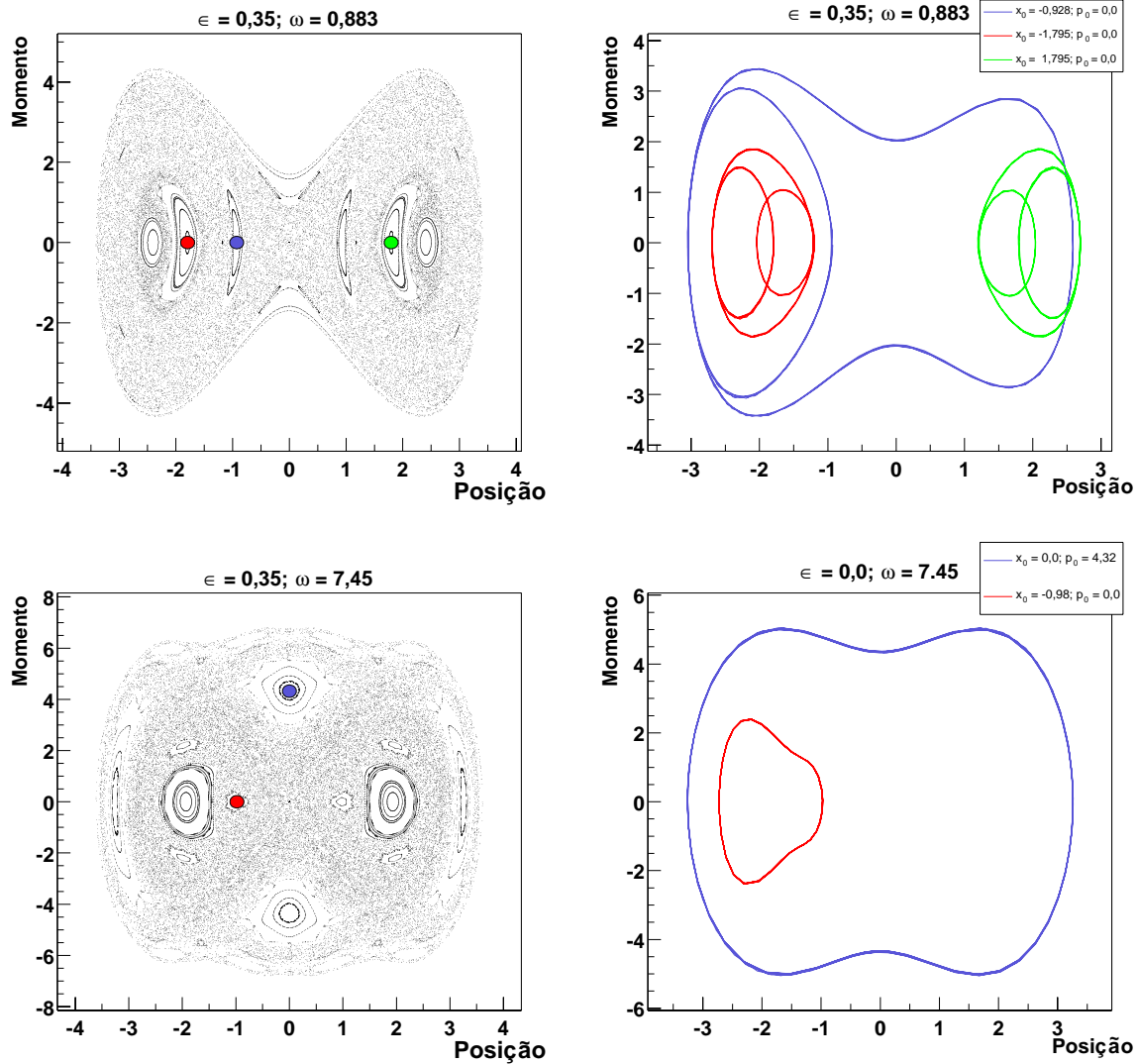


Figura 2.6: Mapas estroboscópicos e representações contínuas de algumas órbitas. Essa figura ilustra que nem sempre os mapas são suficientes para compreender a dinâmica. Nestes casos eles não deixam claro quais ilhas correspondem a movimento livre e quais a movimento confinado.

tempo antes de se afastarem. Esta informação será importante para a interpretação de alguns dos resultados. À direita, na mesma figura, vemos a energia destas órbitas como função do tempo, ilustrando que a energia inicial de uma partícula clássica ou a inicial média de um pacote de ondas quântico não é um parâmetro muito útil neste sistema. A partícula ou o pacote, pode ganhar ou perder energia no potencial dependente do tempo de uma forma complicada.

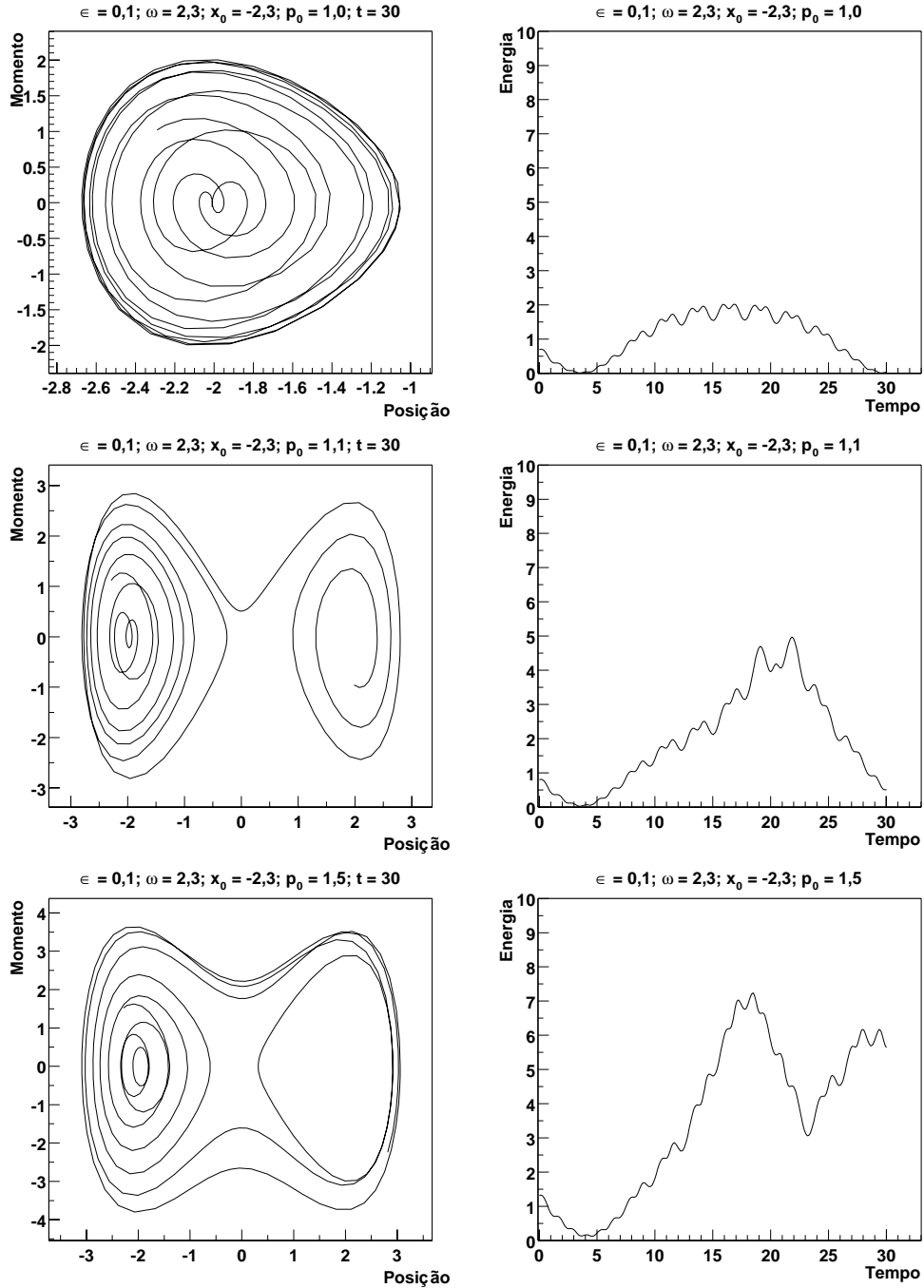


Figura 2.7: Algumas órbitas do segundo mapa da figura 2.2 e suas energias como função do tempo. O primeiro gráfico mostra uma órbita no limite de uma ilha regular e, os dois seguintes, órbitas da região caótica. Vemos que uma condição inicial caótica próxima de uma ilha regular permanece algum tempo na sua vizinhança.

# Capítulo 3

## A Dinâmica Quântica

### 3.1 Caso Independente do Tempo

Analogamente ao que fizemos ao considerar a dinâmica clássica no capítulo anterior, vamos começar o estudo da dinâmica quântica pelo caso  $\epsilon = 0$ , em que o potencial é independente do tempo.

Resolvemos o problema da propagação de um pacote de ondas no potencial dado pela expressão (1.2) diagonalizando o Hamiltoniano. Para isto primeiramente calculamos os elementos de matriz do Hamiltoniano na base do poço de potencial quadrado infinito  $\{\Phi_n\}$ .

$$\Phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \cos\left(\frac{n\pi x}{2L} - \frac{(n-1)\pi}{2}\right)$$

A forma simples das auto funções do poço quadrado facilita os cálculos envolvidos.

Um aparente empecilho para a diagonalização numérica é o fato das representações matriciais deste Hamiltoniano serem infinitas, já que não há limite máximo para as energias permitidas ao oscilador. No entanto essa representação pode ser truncada, porque só estamos interessados em escrever com precisão estados com energia comparável à da barreira. Efetuamos numericamente a diagonalização da matriz truncada [16] na base do poço quadrado infinito. Para selecionar os auto estados obtidos com boa precisão, repetimos a diagonalização incluindo um número maior de elementos e encontramos o auto estado de maior energia para o qual os resultados coincidem.

Para escolher a largura  $L$  do poço quadrado de maneira adequada, estimamos a energia do maior auto estado do poço quártico que desejávamos obter na diagonalização, antes da seleção por convergência. Atribuímos a  $L$  o valor da largura do potencial quártico para essa energia. Desta maneira, ao construir os auto

estados de nosso potencial usando a base do poço quadrado garantimos que estes se aproximem de zero além dos limites do potencial [17].

Com os auto vetores obtidos através da diagonalização, reconstruímos as auto funções do nosso Hamiltoniano:

$$\Psi_l(x) = \sum_n C_{nl} \Phi_n(x)$$

onde  $\{C_{1l}, C_{2l}, C_{3l}, \dots\}$  são os elementos do  $l$ -ésimo auto vetor. Escrevemos o pacote de ondas no instante zero,  $f(x, 0)$ , na base  $\{\Psi_l\}$ , e assim pudemos calcular trivialmente sua evolução temporal:

$$f(x, 0) = \sum_l D_l \Psi_l(x)$$

$$f(x, t) = \sum_l \exp\left(\frac{-iE_l t}{\hbar}\right) D_l \Psi_l(x)$$

Para isto é preciso calcular os números  $\{D_l\}$ , os componentes de  $f(x, 0)$  na base  $\{\Psi_l\}$ . Calculamos primeiro os componentes  $\{F_n\}$  de  $f(x, 0)$  na base do poço quadrado.

$$F_n = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, 0) \Phi_n(x) dx$$

e observamos que

$$D_l = \sum_n C_{nl} F_n$$

Com isso chegamos à expressão completa para  $f(x, t)$

$$f(x, t) = \sum_l \exp\left(\frac{-iE_l t}{\hbar}\right) \left(\sum_n C_{nl} F_n\right) \left(\sum_k C_{kl} \Phi_k(x)\right)$$

A figura 3.1 mostra uma propagação obtida através da técnica que acabamos de expor. Utilizamos  $\hbar = 0,0144$ ,  $a = 0,12$ , posição inicial  $x_0 = -2,0$  e momento inicial  $p_0 = 2,0$ . O pacote tem portanto energia 2, enquanto a altura da barreira é 4. Substituindo estes valores em (1.3) chegamos à função de onda inicial:

$$f(x, 0) = \pi^{-\frac{1}{4}} (0,12)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{-(x+4)^2}{2(0,12)^2} + \frac{i2x}{0,0144} - \frac{-2i}{0,0144}\right)$$

Nesta propagação é interessante notar que o pacote permanece confinado a seu poço de origem e que sua oscilação é razoavelmente coerente, nisto seu comportamento assemelha-se ao de uma partícula. Esta última constatação é bastante satisfatória já que desejamos utilizar estes pacotes para representar a propagação de partículas no potencial e estudar seu tunelamento.

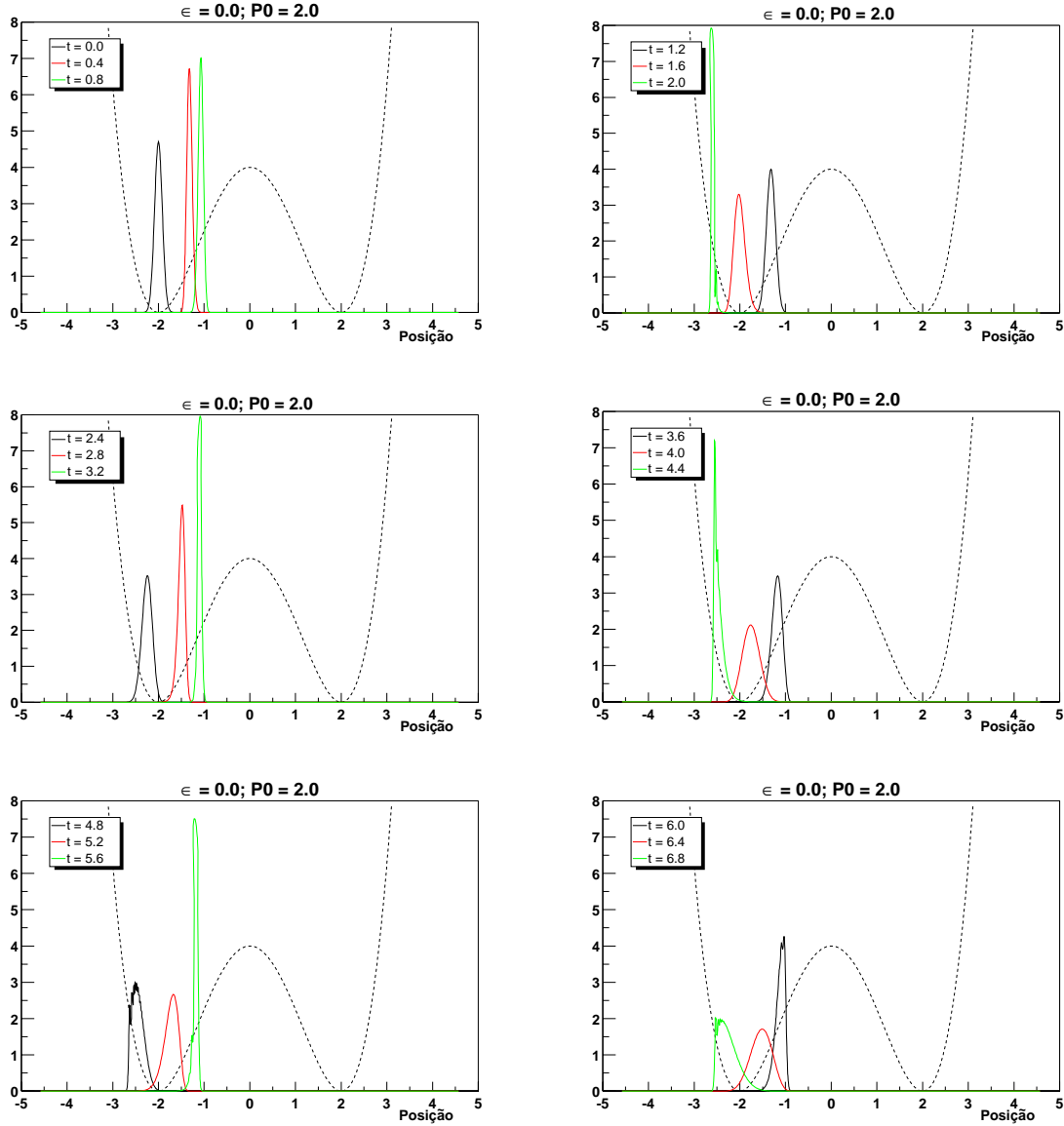


Figura 3.1: Propagação de um pacote de ondas do tipo expressão (1.3) com  $\hbar = 0,0144$ ,  $a = 0,12$ ,  $x_0 = -2,0$  e  $p_0 = 2,0$  ( $E_0 = 2,0$ )

### 3.2 A Dinâmica Quântica com Potencial Dependente do Tempo

Incluída a dependência temporal no Hamiltoniano já não existem auto funções para serem utilizadas como base reduzindo as contas da propagação de pacotes

a operações algébricas. A seguir expomos brevemente os três métodos testados para resolver o problema.

### 3.2.1 Estados de Floquet

Nossa primeira tentativa foi resolver diretamente (numericamente) a equação de Schrödinger dependente do tempo fazendo uso do teorema de Floquet para sistemas de equações diferenciais ordinárias lineares com coeficientes periodicamente dependentes do tempo, isto é, equações da forma:

$$i\frac{d}{dt}X(t) = H(t)X(t) \quad (3.1)$$

onde  $H(t)$  é uma matriz periódica de período  $T$ .

Procuramos uma solução principal da matriz acima, isto é, uma matriz solução  $X(t)$  com determinante 1(um). Desta maneira suas colunas serão uma base ortonormal para as soluções do problema.

O teorema de Floquet citado acima garante que as equações da forma (3.1) admitem solução com determinante diferente de zero da forma:

$$F(t) = \phi(t)e^{-iQt} \quad (3.2)$$

onde  $\phi$  é uma matriz de funções periódicas em  $t$  com período  $T$ , e  $Q$  é uma matriz diagonal constante. Para  $F(t)$  unitária a matriz  $Q$  é real, pois:

$$F(t+T) = \phi(t)e^{-iQt}e^{-iQT} = F(t)e^{-iQT}$$

$$\left. \begin{aligned} F^\dagger(t+T) &= e^{iQ^*t}F^\dagger(t) \\ F^{-1}(t+T) &= e^{iQt}F^{-1}(t) \end{aligned} \right\} \Rightarrow Q^* = Q$$

Resolvemos a equação de Schrödinger procurando uma solução da forma (3.2) para um Hamiltoniano particular [7].

Escrevendo  $F(t)$  e  $H(t)$  em série de Fourier e impondo que satisfaçam (3.1), obtemos um sistema linear infinito independente do tempo que pode ser visto como um problema de autovalores. Assim teremos substituído um sistema finito periodicamente dependente do tempo por um sistema infinito independente do tempo, passível de ser diagonalizado diretamente de maneira aproximada. A partir das soluções deste encontramos as soluções do problema original.

$H$  e  $F$  são dados em série de Fourier pelas expressões abaixo:

$$F_{\alpha\beta} = \sum_n F_{\alpha\beta}^n e^{inwt} e^{-iq_\beta t} \quad , \quad H_{\alpha\beta} = \sum_n H_{\alpha\beta}^n e^{inwt}$$

onde os índices gregos indicam estados do sistema físico e os romanos indicam coeficientes de Fourier. Impomos que  $H$  e  $F$  satisfaçam (3.1)

$$i \frac{d}{dt} F_{\alpha\beta} = (H \cdot F)_{\alpha\beta}$$

o que resulta na equação

$$\sum_n F_{\alpha\beta}^n (q_\beta - nw) e^{inwt - iq_\beta t} = \sum_{\gamma nk} H_{\alpha\gamma}^n e^{i(n+k)wt} F_{\gamma\beta}^k e^{-iq_\beta t}$$

Igualando coeficientes de Fourier obtemos o sistema linear

$$\sum_{\gamma k} \underbrace{[H_{\alpha\gamma}^{n-k} + nw \delta_{\alpha\gamma} \delta_{nk}]}_{HF} F_{\gamma\beta}^k = q_\beta F_{\alpha\beta}^n \quad (3.3)$$

$HF$  pode ser visto como a representação matricial de um operador onde  $\gamma$  e  $k$  são índices de coluna e  $\alpha$  e  $n$  são índices de linha. Chamamos  $HF$  de Hamiltoniano de Floquet.

Em um exemplo  $2 \times 2$  fica mais claro em que base sugerimos que seja escrito  $HF$ . Supondo que o Hamiltoniano original do problema esteja escrito na base:

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ e } |\beta\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Então  $HF$  estará escrito na base  $|\alpha n\rangle$ , onde

$$|\beta 2\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{matrix} n = -1 \\ n = 0 \\ n = 1 \\ n = 2 \\ n = 3 \end{matrix}$$

O vetor  $|\alpha n\rangle$  é infinito e pode ser dividido em blocos de tamanho igual à dimensão do problema original, cada bloco correspondendo a um coeficiente de Fourier. Os blocos com índice diferente de  $n$  são compostos por zeros e o bloco com índice  $n$  é igual ao vetor  $\alpha$ .

Olhando para a equação (3.3), que dá os elementos de  $HF$ , vemos que apenas os diagonais dependem de  $n$ . Os demais dependem da diferença  $n - k$ . Se ordenarmos as linhas e colunas de  $HF$  de tal forma que os índices de estado físico ( $\alpha$  e  $\beta$ ) assumam todos os valores possíveis antes que os índices de Fourier ( $n$  e  $k$ ) sejam incrementados, obtemos uma matriz composta por blocos de dimensão igual à de  $H$ .

Prosseguindo com o exemplo, se



$$H = \begin{bmatrix} E_\alpha & 2b \cos(wt) \\ 2b \cos(wt) & E_\beta \end{bmatrix},$$

então

$$HF = H_{\alpha\gamma}^{n-k} + nw\delta_{\alpha\gamma}\delta_{nk}$$

$b$	$0$	$0$	$0$	$0$	$0$	$0$	$0$
$E_\alpha - 2w$	$0$	$0$	$b$	$0$	$0$	$0$	$0$
$0$	$E_\beta - 2w$	$b$	$0$	$0$	$0$	$0$	$0$
$0$	$b$	$E_\alpha - w$	$0$	$0$	$b$	$0$	$0$
$b$	$0$	$0$	$E_\beta - w$	$b$	$0$	$0$	$0$
$0$	$0$	$0$	$b$	$E_\alpha$	$0$	$0$	$b$
$0$	$0$	$b$	$0$	$0$	$E_\beta$	$b$	$0$
$0$	$0$	$0$	$0$	$0$	$b$	$E_\alpha + w$	$0$
$0$	$0$	$0$	$0$	$b$	$0$	$0$	$E_\beta + w$
$0$	$0$	$0$	$0$	$0$	$0$	$0$	$b$
$0$	$0$	$0$	$0$	$0$	$0$	$0$	$E_\alpha + 2w$

Vemos que somar  $p\omega \cdot I$  a  $HF$ , onde  $p$  é um inteiro, equivale a realizar uma translação diagonal da matriz. Portanto, se  $\lambda$  for um autovalor de  $HF$ ,  $\lambda + pw$  também será, já que substituir um pelo outro deixa inalterada a equação característica. Assim, os autovalores de  $HF$ , infinitos em número, podem ser agrupados em famílias. Dentro de uma mesma família, os autovalores diferem apenas por múltiplos inteiros de  $\omega$ ; para conhecer toda uma família basta conhecer um de seus elementos. Esperamos que o mesmo aconteça com os autovetores associados a esses autovalores. Vemos na equação (3.3) que os  $q_\beta$  são autovalores de  $HF$ , logo há uma família para cada  $q_\beta$ , e os  $F_{\alpha\beta}^n$  são os componentes dos seus autovetores associados. Veremos a seguir que autovetores associados a membros de uma mesma família diferem apenas por uma translação dos elementos.

Para simplificar a notação definimos:

$$q_\alpha + nw \equiv \lambda_{\alpha n},$$

$$|\lambda_{\alpha n}\rangle \equiv \text{autovetor associado a } \lambda_{\alpha n}$$

Assim, podemos escrever:

$$HF|\lambda_{\beta(m+p)}\rangle = (q_\beta + (m+p)\omega)|\lambda_{\beta(m+p)}\rangle$$

$$(HF - p\omega \cdot I)|\lambda_{\beta(m+p)}\rangle = (q_\beta + mw)|\lambda_{\beta(m+p)}\rangle$$

mas  $(HF - p\omega \cdot I)$  é apenas  $HF$  transladada  $p$  blocos para baixo, assim a equação acima é o mesmo que

$$HF|\lambda_{\beta(m+p)}^{-p}\rangle = \lambda_{\beta m}|\lambda_{\beta(m+p)}^{-p}\rangle$$

onde  $|\lambda_{\beta(m+p)}^{-p}\rangle$  denota o vetor  $|\lambda_{\beta(m+p)}\rangle$  trasladado  $p$  blocos para cima.

Como o polinômio característico de  $HF$  é composto apenas por monômeros, não há autovetores degenerados, portanto  $|\lambda_{\beta(m+p)}^{-p}\rangle = |\lambda_{\beta m}\rangle$ , ou seja,

$$\boxed{\langle \alpha \mathbf{n} + \mathbf{p} | \lambda_{\beta(\mathbf{m}+\mathbf{p})} \rangle = \langle \alpha \mathbf{n} | \lambda_{\beta \mathbf{m}} \rangle}$$

Basta lembrar que  $\langle \alpha n + p |$  é  $\langle \alpha n |$  trasladado de  $p$  blocos.

Como dito anteriormente,  $F_{\alpha\beta}^n$  são os componentes do autovetor associado ao autovalor  $q_\beta$ , isto é,  $F_{\alpha\beta}^n = \langle \alpha n | \lambda_{\beta 0} \rangle$  a não ser, possivelmente por uma fase. No entanto, qualquer dos autovetores de uma mesma família e seu respectivo autovalor podem ser usados para escrever  $F_{\alpha\beta}(t)$ :

$$\begin{aligned} F_{\alpha\beta}(t) &= \sum_n F_{\alpha\beta}^n e^{inwt} e^{-iq_\beta t} = \sum_n \langle \alpha n | \lambda_{\beta 0} \rangle e^{inwt} e^{-iq_\beta t} \\ &= \sum_n \langle \alpha n + p | \lambda_{\beta p} \rangle e^{inwt} e^{-q_\beta t} = \sum_n \langle \alpha n + p | \lambda_{\beta p} \rangle e^{i(n+p)wt} e^{-(q_\beta + pw)t} \\ &= \sum_n \langle \alpha n | \lambda_{\beta p} \rangle e^{inwt} e^{-(q_\beta + pw)t} \end{aligned}$$

Na verdade isto não é surpreendente já que uma vez identificada uma família de autovalores a escolha daquele a ser denominado  $q_\beta$  é arbitrária.

Para que este método possa ser utilizado, é preciso que o erro no cálculo dos autovalores seja muito menor que  $w$ , já que deve ser possível identificar diferenças de múltiplos de  $w$  entre os autovalores para que possam ser agrupados em famílias.

Ao utilizar este método, nossos resultados ficaram muito aquém do esperado e não obtivemos precisão suficiente para fazer a separação em famílias. Acreditamos que isto se deve ao fato de nosso Hamiltoniano dependente do tempo ser o truncamento de um Hamiltoniano de dimensão infinita e ter já por si dimensão em torno de 500. Pudemos adicionar apenas poucos termos da série de Fourier, já que cada novo par de termos representa um acréscimo de 1000 na dimensão do problema. Este método é mais adequado para problemas de dimensão baixa [7].

### 3.2.2 Discretização da Equação de Schrödinger

Este método consiste em aproximar a equação de Schrödinger por uma equação de diferenças finitas. Sua solução é uma função de onda discretizada no tempo e no espaço. Ou seja,

$$\psi(x, t) \rightarrow \psi_j^n$$

onde  $j$  denota a posição espacial e  $n$  o instante de tempo.

Desejamos encontrar uma forma discreta ( $\psi_j''$ ) para  $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$ . Consideramos três pontos consecutivos no espaço discretizado,  $(j-1)$ ,  $j$ ,  $(j+1)$ . Pelo teorema do valor médio existem um ponto ( $\eta_{-1}$ ) entre  $(j-1)$  e  $j$  e outro ( $\eta_1$ ) entre  $j$  e  $(j+1)$  tais que

$$\frac{\partial \psi(\eta_{-1}, t)}{\partial x} = \frac{\psi_j - \psi_{j-1}}{\Delta x}, \quad \frac{\partial \psi(\eta_1, t)}{\partial x} = \frac{\psi_{j+1} - \psi_j}{\Delta x}$$

Usando mais uma vez o teorema do valor médio podemos afirmar que há um ponto  $\eta_0$  entre  $\eta_{-1}$  e  $\eta_1$  tal que

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(\eta) = \frac{\psi'(\eta_1) - \psi'(\eta_{-1})}{\Delta x} = \frac{(\frac{\psi_{j+1} - \psi_j}{\Delta x}) - (\frac{\psi_j - \psi_{j-1}}{\Delta x})}{\Delta x} = \frac{\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}}{(\Delta x)^2}$$

Aproximamos  $\psi_j''$  por esse valor. Esta aproximação é correta até ordem de  $\Delta x$ , como pode ser visto através do raciocínio a seguir:

$$\begin{aligned} \psi_{j+1} &= \psi_j + (\Delta x)\psi_j' + \frac{1}{2}(\Delta x)^2\psi_j'' + \frac{1}{6}\psi_j''' + O((\Delta x)^4) \\ \psi_{j-1} &= \psi_j - (\Delta x)\psi_j' + \frac{1}{2}(\Delta x)^2\psi_j'' - \frac{1}{6}\psi_j''' + O((\Delta x)^4) \end{aligned}$$

Somando as duas expressões e colocando  $\psi_j''$  em evidência obtemos

$$\psi_j'' = \frac{\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}}{(\Delta x)^2} + \frac{O((\Delta x)^4)}{(\Delta x)^2}$$

Aproximamos então a ação de  $H$  sobre  $\psi$  por

$$H\psi_j = \frac{\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}}{(\Delta x)^2} - V_j\psi_j$$

Neste tratamento o tempo também é uma variável discreta. Para encontrar a evolução temporal de  $\psi$ , fazemos a aproximação de que o Hamiltoniano é constante entre dois instantes  $n$  e  $n+1$  e portanto  $\psi_{n+1}$  está relacionado a  $\psi_n$  por

$$\psi^{n+1} = e^{\frac{-iH_n\Delta t}{\hbar}}\psi_n \quad (3.4)$$

Utilizaremos apenas a aproximação de primeira ordem em  $H$  da exponencial,

$$e^{\frac{-i\Delta t H}{\hbar}} \simeq 1 - \frac{i\Delta t H}{\hbar} \quad (3.5)$$

no entanto este operador não é unitário, e portanto é inadequado para produzir a evolução temporal de um pacote de ondas. Se rescrevermos a equação (3.4) antes de tomar a aproximação linear:

$$\psi^{n+1} = e^{\frac{-iH_n\Delta t}{2\hbar}} (e^{\frac{iH_n\Delta t}{2\hbar}})^{-1} \psi^n \quad (3.6)$$

obtemos, ao tomar a aproximação, o operador unitário:

$$(1 - \frac{i\Delta t H}{2\hbar})(1 + \frac{i\Delta t H}{2\hbar})^{-1} \quad (3.7)$$

É fácil ver que este operador de fato é unitário pois os dois termos comutam fazendo com que  $U^\dagger = U^{-1}$

$$U^\dagger = (1 - \frac{i\Delta t H}{2\hbar})^{-1} (1 + \frac{i\Delta t H}{2\hbar}) = (1 + \frac{i\Delta t H}{2\hbar})(1 - \frac{i\Delta t H}{2\hbar})^{-1} = U^{-1}$$

Podemos escrever (3.6) como

$$e^{\frac{iH_n\Delta t}{2\hbar}} \psi_j^{n+1} = e^{\frac{-iH_n\Delta t}{2\hbar}} \psi_j^n$$

Tomando a aproximação linear

$$(1 + \frac{i\Delta t H}{\hbar}) \psi_j^{n+1} = (1 - \frac{i\Delta t H}{\hbar}) \psi_j^n$$

e utilizando a aproximação discreta de  $H$  e agrupando termos:

$$\begin{aligned} & \frac{-i\hbar\Delta t}{4m(\Delta x)^2} \psi_{j+1}^{n+1} + [1 + \frac{i\hbar\Delta t}{2m(\Delta x)^2} + \frac{i\Delta t}{2\hbar} V_j^n] \psi_j^{n+1} - \frac{i\hbar\Delta t}{4m(\Delta x)^2} \psi_{j-1}^{n+1} \\ = & \frac{-i\hbar\Delta t}{4m(\Delta x)^2} \psi_{j+1}^n + [1 - \frac{i\hbar\Delta t}{2m(\Delta x)^2} - \frac{i\Delta t}{2\hbar} V_j^n] \psi_j^n + \frac{i\hbar\Delta t}{4m(\Delta x)^2} \psi_{j-1}^n \end{aligned} \quad (3.8)$$

A partir do estado inicial ( $n = 0, t = 0$ ), calculamos os  $\psi_j^1$ ; a partir dos  $\psi_j^1$ , calculamos os  $\psi_j^2$ ; e assim por diante. Em geral, a partir da função de onda no instante  $n$ , calculamos a função de onda no instante  $n + 1$ . Para tornar mais explícita a forma como é feito esse cálculo, definimos as variáveis auxiliares:

$$\begin{aligned} \alpha & \equiv \frac{-i\hbar\Delta t}{4m(\Delta x)^2} \\ \beta_j^n & \equiv 1 + \frac{i\hbar\Delta t}{2m(\Delta x)^2} + \frac{i\Delta t}{2\hbar} V_j^n \\ \xi_j^n & \equiv -\alpha \psi_{j+1}^n + (\beta_j^n)^* \psi_j^n - \alpha \psi_{j-1}^n \end{aligned} \quad (3.9)$$

onde as definições envolvem apenas grandezas conhecidas. A equação (3.8) fica

$$\alpha\psi_{j+1}^{n+1} + \beta_j^n\psi_j^{n+1} + \alpha\psi_{j-1}^{n+1} = \xi_j^n$$

e pode ser representada por um sistema tridiagonal.

$$\begin{pmatrix} \beta_1^n & \alpha & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \alpha & \beta_2^n & \alpha & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \alpha & \beta_j^n & \alpha & 0 & \cdots \\ & & & & & \\ \cdots & 0 & 0 & 0 & \alpha & \beta_{j-1}^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1^{n+1} \\ \psi_2^{n+1} \\ \psi_3^{n+1} \\ \vdots \\ \psi_{j-1}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi_1^{n+1} \\ \xi_2^{n+1} \\ \xi_3^{n+1} \\ \vdots \\ \xi_{j-1}^{n+1} \end{pmatrix}$$

Assim, para calcular a função de onda em um instante  $t$ , é preciso resolver repetidas vezes um sistema tridiagonal usando cada vez o vetor dos  $\psi^{n+1}$  fornecido como resultado para calcular os novos  $\xi^{n+1}$ .

O livro *Numerical Recipes in C* [16] contém rotinas para resolver os sistemas tridiagonais.

Este método é, em princípio, aplicável tanto para o caso independente do tempo quanto para o caso dependente do tempo. Começamos testando-o para o caso independente do tempo e comparando os resultados com aqueles obtidos a partir da diagonalização direta do Hamiltoniano. Obtivemos resultados bastante satisfatórios para momentos baixos, mas para momentos altos, o método mostrou-se inadequado.

O terceiro e último método que será apresentado a seguir também faz uso da aproximação do operador de evolução temporal entre instantes próximos por  $e^{\frac{-iHt}{\hbar}}$ , mas não o aproxima mais uma vez por um operador linear.

### 3.2.3 Solução da Equação de Schrödinger via FFT

Neste método, a integral envolvida no cálculo do estado de um sistema no instante  $t$ ,  $\psi(t, x)$ , a partir de seu estado no instante inicial  $t_0$ ,  $\psi(t_0, x)$ , é reduzida a um número grande de integrais do tipo transformada de Fourier. Ganhamos assim a possibilidade de utilizar os algoritmos FFT (Fast Fourier Transform) na integração [16].

Um sistema cujo estado inicial é descrito na representação de posição pela função  $\psi(x, t_0)$  encontra-se no instante  $t$  em um estado descrito pela função

$$\psi(x, t) = \langle x | \psi_t \rangle = \langle x | U(t, t_0) | \psi_{t_0} \rangle \quad (3.10)$$

onde  $U$  é o operador de evolução temporal. Quando o Hamiltoniano que caracteriza o sistema independe do tempo, podemos escrever

$$U(t, t_0) = \exp\left(\frac{-iH(t - t_0)}{\hbar}\right) = \prod_{n=1}^N \exp\left(\frac{-iH Dt}{\hbar}\right)$$

onde  $Dt = \frac{t-t_0}{N}$ . Para Hamiltonianos dependentes do tempo, esta expressão não é mais válida, mas podemos aproximar o operador de evolução temporal por:

$$U(t, t_0) \simeq \tau \prod_{n=1}^N \exp\left(\frac{-iH(t_0 + nDt)Dt}{\hbar}\right) \quad (3.11)$$

onde  $\tau$  é o operador de ordenamento temporal.

Se o Hamiltoniano for do tipo  $H = \frac{p^2}{2m} + V(x, t)$ , cada termo do produtório acima pode ser aproximado por qualquer das duas formas:

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{-iH(t_0 + nDt)Dt}{\hbar}\right) &\simeq \exp\left(\frac{-ip^2 Dt}{2m\hbar}\right) \exp\left(\frac{-iV(t_0 + nDt)Dt}{\hbar}\right) \\ &\simeq \exp\left(\frac{-iV(t_0 + nDt)Dt}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{-ip^2 Dt}{2m\hbar}\right) \end{aligned} \quad (3.12)$$

O método para calcular  $\psi(t)$  usando *FFT* começa pela inserção no lado direito de (3.10) de um operador identidade na base  $x$  e outro na base  $p$ , usando a primeira das aproximações (3.12):

$$\begin{aligned} \psi(t) &\simeq \int \int dx_1 dp_1 \langle x | \tau \prod_{n=2}^N e^{\frac{-iH(t_0 + nDt)Dt}{\hbar}} | p_1 \rangle \langle p_1 | e^{\frac{-ip^2 Dt}{2m\hbar}} e^{\frac{-iV(t_0 + Dt)Dt}{\hbar}} | x_1 \rangle \langle x_1 | \psi_0 \rangle \\ &= \int \int dx_1 dp_1 \langle x | \tau \prod_{n=2}^N e^{\frac{-iH(t_0 + nDt)Dt}{\hbar}} | p_1 \rangle \\ &\quad e^{\frac{-ip_1 x_1}{\hbar}} e^{\frac{-ip_1^2 Dt}{2m\hbar}} e^{\frac{-iV(x_1, t_0 + Dt)Dt}{\hbar}} \psi_0(x_1) \end{aligned} \quad (3.13)$$

Considerando isoladamente as funções com dependência em  $x_1$ , vemos que a integral a ser feita é uma transformada de Fourier inversa cujo resultado chamaremos de  $f(p_1)$

$$f(p_1) = \int dx_1 e^{\frac{-ip_1 x_1}{\hbar}} e^{\frac{-iV(x_1, t_0 + Dt)Dt}{\hbar}} \psi_0(x_1)$$

Os passos seguintes consistem em inserir alternadamente identidades nas bases  $x$  e  $p$ , entre os termos do produtório (3.11) usando também alternadamente as aproximações (3.12).

$$\begin{aligned}
\psi(t) &\simeq \int dp_1 dx_2 \langle x | \tau \prod_{n=3}^N e^{\frac{-iH(t_0+nDt)Dt}{\hbar}} | x_2 \rangle \langle x_2 | e^{\frac{-iV(t_0+2Dt)}{\hbar}} e^{\frac{-ip_1^2 Dt}{2m\hbar}} | p_1 \rangle e^{\frac{-ip_1^2 Dt}{2m\hbar}} f(p_1) \\
&= \int dp_1 dx_2 \langle x | \tau \prod_{n=3}^N e^{\frac{-iH(t_0+nDt)Dt}{\hbar}} | x_2 \rangle \\
&\quad e^{\frac{ip_1 x_2}{\hbar}} e^{\frac{-iV(x_2, t_0+2Dt)}{\hbar}} e^{\frac{-ip_1^2 Dt}{m\hbar}} f(p_1)
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Separando a integral em  $p_1$ , vemos que dela resulta uma função de  $x_2$

$$g(x_2) = \int dp_1 e^{\frac{ix_2 p_1}{\hbar}} e^{\frac{-ip_1^2 Dt}{m\hbar}} f(p_1)$$

Depois deste passo temos:

$$\begin{aligned}
\psi(t) &\simeq \int dx_2 dp_2 \langle x | \tau \prod_{n=4}^N e^{\frac{-iH(t_0+nDt)Dt}{\hbar}} | p_2 \rangle \langle p_2 | e^{\frac{-ip_1^2 Dt}{m\hbar}} e^{\frac{-iV(x_2, t_0+3Dt)}{\hbar}} | x_2 \rangle \\
&\quad e^{\frac{-iV(x_2, t_0+2Dt)}{\hbar}} g(x_2)
\end{aligned}$$

A situação agora é a mesma do primeiro passo, equação (3.13). Para prosseguir inserimos uma identidade na representação  $x$  e assim por diante, reduzindo cada par de passos no tempo a uma transformada de Fourier e uma transformada inversa.

Na figura 3.2, vemos a propagação de um pacote de ondas no potencial dependente do tempo calculada via FFT. A condição inicial do centro neste caso é  $(-0,928; 0,0)$ , os parâmetros do Hamiltoniano são  $\epsilon = 0,35$  e  $\omega = 0,883$ , os mesmos utilizados para gerar o primeiro mapa estroboscópico da figura 2.6. Através desse mapa conhecemos a dinâmica clássica à qual o pacote está sujeito e, no gráfico ao lado do mapa, a órbita clássica do centro do pacote está representada em azul. A propagação do pacote quântico reproduz algumas características marcantes da órbita clássica, como sua assimetria no afastamento máximo com relação à barreira e a alternância entre reflexão e transmissão. Esta é uma comprovação de que nossos pacotes localizados são boas representações quânticas de partículas e que de fato estamos no regime semiclassico do nosso modelo.

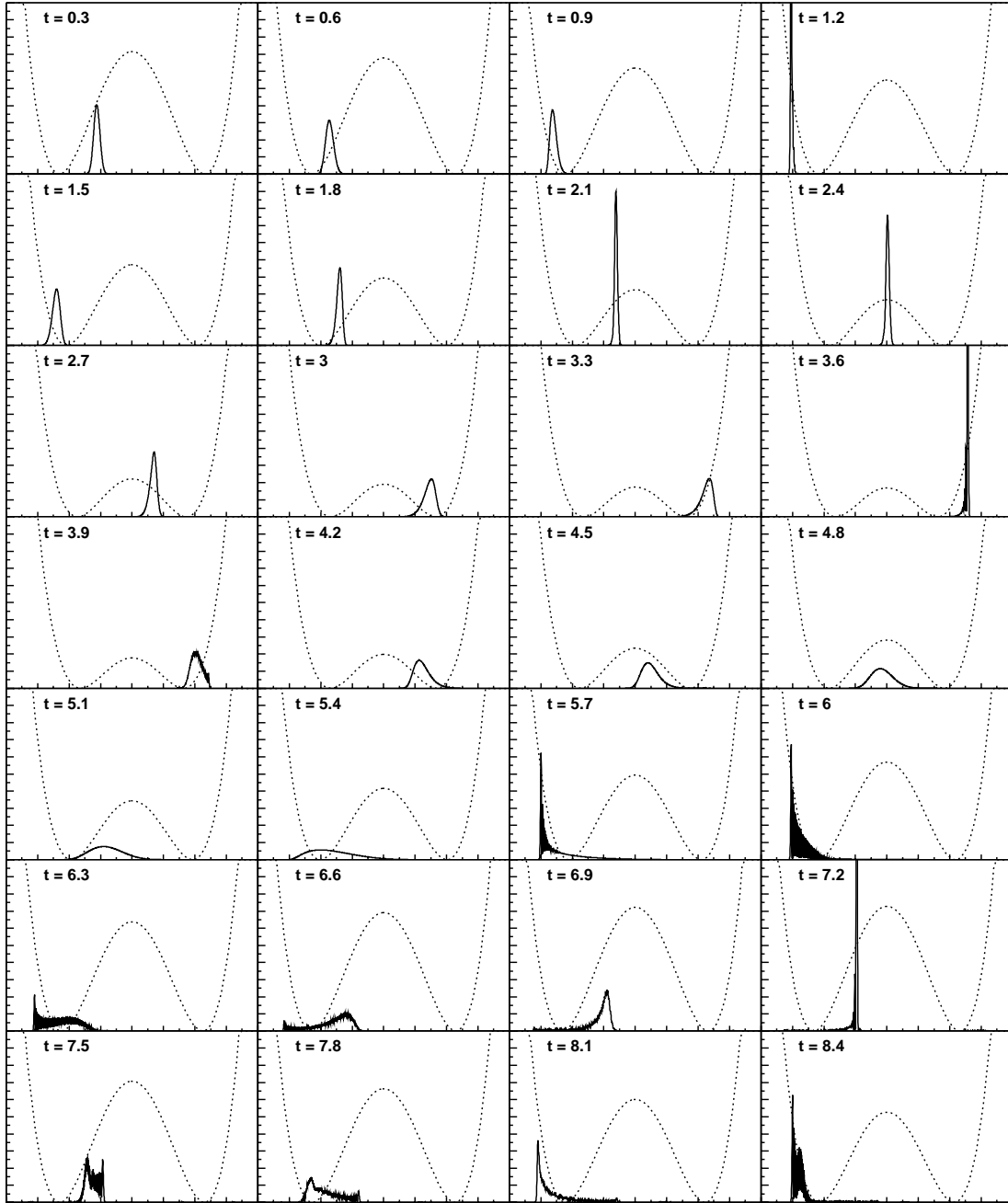


Figura 3.2: Propagação de um pacote de ondas inicialmente centrado em  $(-0,928; 0,0)$  no potencial dependente do tempo com  $\epsilon = 0,35$ ,  $\omega = 0,883$ . Nesta propagação vemos a mesma assimetria no afastamento máximo da barreira que pode ser observada na órbita clássica da condição inicial do centro do pacote (em azul no segundo gráfico da esquerda para a direita na figura 2.6). Assim como a partícula clássica o pacote ora é refletido ora é transmitido pela barreira.



# Capítulo 4

## Tunelamento

Ao estudar o comportamento de uma onda plana na presença de uma barreira de potencial, as energias desta e daquela podem ser comparadas diretamente, já que a uma onda plana está associada uma única energia. Para medir o tunelamento de uma onda com energia inferior à de uma barreira, é suficiente medir a transmissão, pois o tunelamento é o único efeito através do qual esta é possível. O caso dos pacotes de ondas é diferente. Eles são em geral compostos por diversos estados quânticos com energias distintas. Por isto, ao medir a transmissão, o que se obtém na verdade é uma mistura de tunelamento e transporte classicamente permitido das componentes do pacote com energia superior à da barreira. Para sistemas dependentes do tempo, este quadro agrava-se porque o pacote de ondas pode ganhar energia durante a propagação, passando a ter uma contribuição maior de componentes de alta energia. Neste trabalho, quando estudamos o caso independente do tempo, foi possível encontrar a decomposição do pacote na base de auto estados do Hamiltoniano e assim controlar a contribuição dos estados de energia alta no transporte do pacote de ondas através da barreira. No caso dependente do tempo no entanto, não trabalhamos com os estados de Floquet, e por isto não pudemos fazer o controle através de uma decomposição análoga. A solução, sugerida pelo Prof. Caio Lewenkopf (UERJ), foi definir uma representação clássica do pacote de ondas, e comparar a sua propagação com a propagação quântica.

Em nossas simulações lançamos sempre os pacotes do poço esquerdo e definimos o transporte quântico como a integral da porção do pacote à direita do máximo da barreira, como ilustra a figura 4.1. Como o pacote está em movimento, esta integral assume um valor diferente em cada instante, e nós fizemos medidas do transporte em função do tempo. Vale lembrar que a perturbação dependente do tempo foi escolhida de forma a manter o ponto de máximo da barreira fixo em  $x = 0$  em todos os instantes.

Assim, se o pacote de ondas inicial é  $f(x, 0)$ , o transporte quântico no instante  $t$  é dado por:

$$T_{\text{quântico}} := \int_0^{\infty} |f(x, t)|^2 dx \quad (4.1)$$

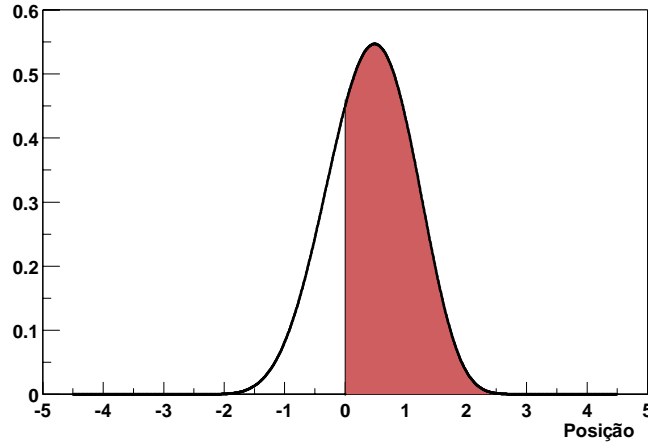


Figura 4.1: Definição do transporte quântico: a integral da porção do pacote à direita do máximo da barreira em cada instante.

Nossa analogia clássica do pacote de ondas é um *ensemble* de sistemas idênticos nos quais propagam simultaneamente partículas materiais com condições iniciais em todos os pontos do espaço de fase, seguindo uma estatística dada pela função de  $(x, p)$  tal que: sua integral em  $x$  é o módulo ao quadrado do pacote de ondas na representação  $p$  e sua integral em  $p$  é o módulo ao quadrado do pacote de ondas na representação  $x$ . Na prática definimos discos no espaço de fase dentro dos quais escolhemos um conjunto uniformemente distribuído de condições iniciais, e atribuímos a cada uma delas um peso de tal forma a simular a estatística do ensemble, ou seja, igual ao valor da função descrita acima, naquele ponto. Para medir o transporte clássico, propagamos cada uma delas utilizando um integrador tipo Runge Kutta de quarta ordem [16], e identificamos a cada instante as que se encontram à direita da barreira, somamos seus pesos e dividimos pela soma total dos pesos de todas as condições iniciais sendo propagadas. A figura 4.2 mostra duas ilustrações esquemáticas do pacote clássico. Os estados iniciais aparecem em vermelho e os estados em instantes posteriores em preto. No primeiro caso (à esquerda) para o instante registrado nenhuma condição inicial atravessa a barreira e portanto o transporte clássico é nulo. No segundo caso uma boa parte

das partículas atravessa a barreira. O transporte clássico é a soma dos pesos de todas elas normalizado pela soma total dos pesos.

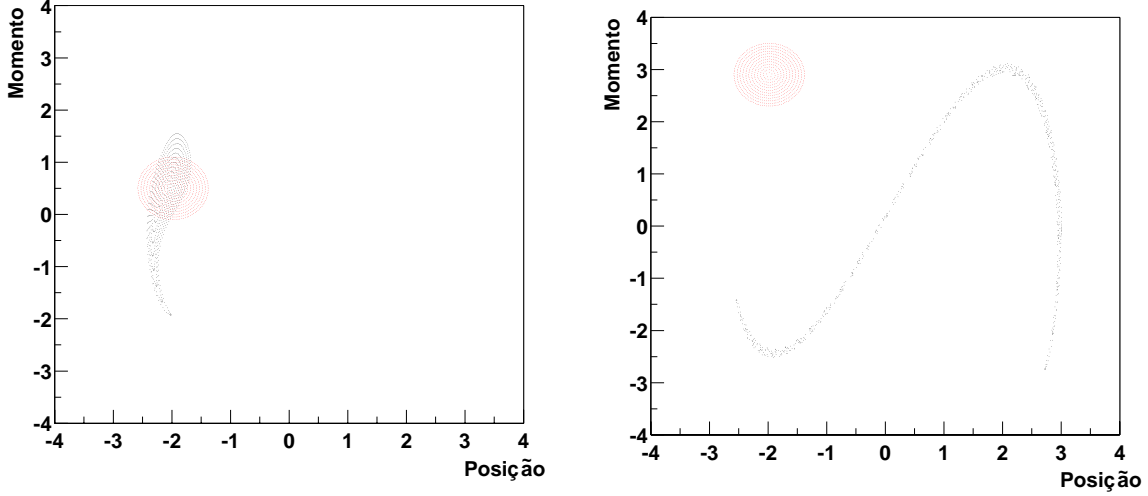


Figura 4.2: Esquema da representação clássica do pacote de ondas. Em vermelho estão os estados iniciais e em preto os estados em instantes posteriores. A cada ponto representado é associado um peso. No diagrama à esquerda nenhuma das condições iniciais ultrapassa a barreira no intervalo de tempo transcorrido. No diagrama à direita o transporte clássico é a soma dos pesos de todos os pontos que se vêem além de  $x = 0$ .

Nós trabalhamos com pacotes gaussianos de incerteza mínima:

$$f(x, 0) = \pi^{-\frac{1}{4}} a^{-\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{-(x - x_0)^2}{2a^2} + \frac{ip_0 x}{\hbar} - \frac{ip_0 x_0}{2\hbar}\right)$$

Ou, no espaço  $p$ :

$$f(p, 0) = \pi^{-\frac{1}{4}} a^{-\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{-(p - p_0)^2}{2a^2} + \frac{ipx_0}{\hbar} + \frac{ip_0 x_0}{2\hbar}\right)$$

Isto define o peso de cada condição inicial do ensemble clássico como:

$$g(x, p) = \pi^{-\frac{1}{2}} a^{-1} \exp\left\{\frac{-(x - x_0)^2}{a^2} - \frac{(p - p_0)^2}{b^2}\right\}$$

onde  $b = \frac{\hbar}{a}$ .

Os pesos são definidos em  $t = 0$  e cada elemento do ensemble mantém o seu para todo o tempo. Assim, o transporte clássico no instante  $t$  é dado por:

$$T_{\text{clássico}} = \frac{\sum_{x>0} \exp\left(\frac{-(x_{i0}-x_0)^2}{a^2} - \frac{(p_{i0}-p_0)^2}{b^2}\right)}{\sum_{x_i} \exp\left(\frac{-(x_{i0}-x_0)^2}{a^2} - \frac{(p_{i0}-p_0)^2}{b^2}\right)} \quad (4.2)$$

onde  $(x_{i0}(x_i, p_i), p_{i0}(x_i, p_i))$  é a condição inicial que propaga para  $(x_i, p_i)$  no tempo  $t$ .

# Capítulo 5

## Resultados

### 5.1 Pacotes de ondas localizados: propagação de partículas

Neste trabalho propusemo-nos a estudar a influência do caos sobre o tunelamento de pacotes de onda localizados, que podem ser vistos como a representação semi-clássica de uma partícula. Nesta seção apresentaremos resultados de transporte clássico e quântico para estados deste tipo. Utilizaremos os seguintes parâmetros na expressão (1.3):

$$\hbar = 0,0144; \quad a = 0,12 \quad \text{e} \quad b = 0,12$$

e portanto as incertezas em  $x$  e em  $p$  são:

$$\Delta x = \frac{a}{\sqrt{2}} = 0,085, \quad \Delta p = \frac{b}{\sqrt{2}} = 0,085$$

Estes valores são pequenos com relação às larguras em  $x$  e  $p$  das ilhas não ressonantes, que tipicamente variam entre 0,3 e 2,7, mas não são desprezíveis se comparados a elas, isto é, os pacotes de onda são pequenos mas não pontuais. Como nosso potencial é simétrico pudemos lançar sempre os pacotes do lado esquerdo da barreira sem perda de generalidade.

Apresentaremos dados para  $\epsilon = 0, 1$  e cinco valores distintos de frequências:  $\omega = 8, 2$ ;  $\omega = 2, 4$ ;  $\omega = 2, 3$ ;  $\omega = 4, 3$ ;  $\omega = 0, 5$ , e também para o caso integrável  $\epsilon = 0, 0$ . Em todas as simulações posicionamos nossos pacotes inicialmente sobre a coordenada  $x$  da órbita periódica não ressonante, isto é, fixada uma frequência e portanto um mapa estroboscópico (uma vez que fixamos  $\epsilon = 0, 1$ ), situamos os pacotes iniciais com coordenada  $x$  igual à do centro das ilhas não ressonantes à

esquerda. Variamos a coordenada  $p$  inicial do centro do pacote e dessa maneira investigamos seu comportamento em função da proximidade da região caótica.

Antes de cada conjunto de gráficos de transporte exibimos o mapa estroboscópico ao qual correspondem e também uma ampliação da região deste de onde são lançados os pacotes. Nesta ampliação os pacotes lançados estão representados por círculos de raio igual à semi-largura  $0,12(=a=b)$ .

Contrário às nossas expectativas, observamos em todos estes casos que, de uma forma geral, o transporte clássico supera o quântico. Esperávamos encontrar uma tendência oposta, já que existem dois mecanismos contribuindo para o transporte quântico, a passagem da porção do pacote com energia superior à da barreira e o tunelamento, enquanto classicamente apenas o primeiro é permitido. Este fenômeno pode ser entendido se lembrarmos que para uma onda plana e uma barreira quadrada a taxa de tunelamento é de apenas 20% quando ambas têm a mesma energia. Isto se deve a que componentes com energia logo acima da barreira, que classicamente são transmitidas, sofrem grande reflexão quântica.

Percebemos que, para pacotes localizados, a região de interesse é a fronteira entre caos e movimento regular. Muito abaixo dela não há transporte de nenhum tipo, pois a maior parte da gaussiana encontra-se inserida profundamente na região regular e a probabilidade de tunelamento é muito pequena, assim como a porção com passagem clássica permitida. Muito acima da barreira, os comportamentos clássico e quântico são quase indistinguíveis, já que o movimento é livre nos dois casos.

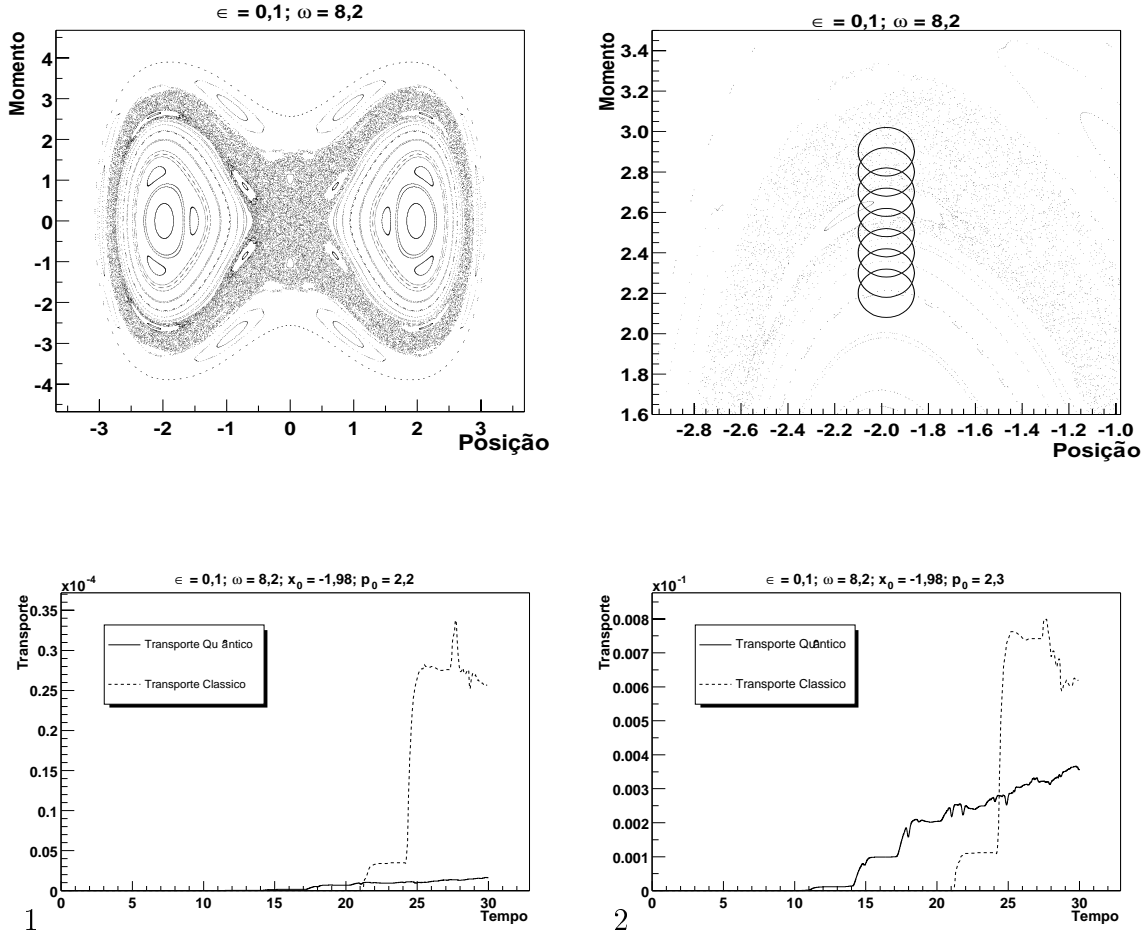
Frequentemente nos resultados, as formas das curvas de transporte como função do tempo clássica e quântica são bastante semelhantes e os gráficos diferem aproximadamente por um termo constante no eixo vertical. Atribuímos isto ao fato de o pacote localizado que utilizamos seguir bastante a trajetória clássica, como foi mostrado em um exemplo no capítulo 3, figura 3.2. Desta maneira os pacotes clássico e quântico atingem a barreira e afastam-se dela quase simultaneamente, tendo oportunidades de passagem quase idênticas, levando as curvas de transmissão a terem picos e mínimos sobre os mesmos instantes de tempo.

Os resultados são apresentados na forma de gráficos de transporte  $\times$  tempo, havendo um gráfico para cada propagação. Isto é, cada gráfico contém as curvas de transporte quântico e clássico para uma posição inicial do centro do pacote. Todos os parâmetros relevantes são especificados no topo das figuras.

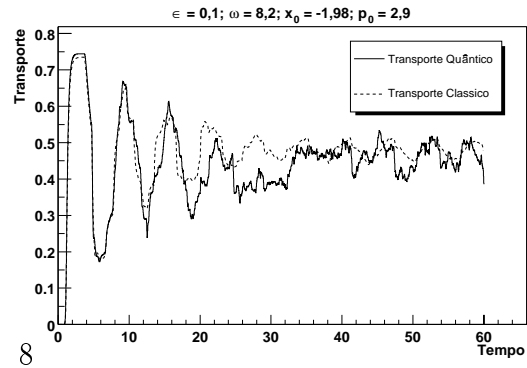
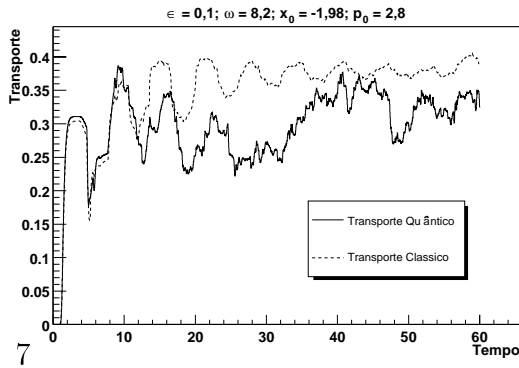
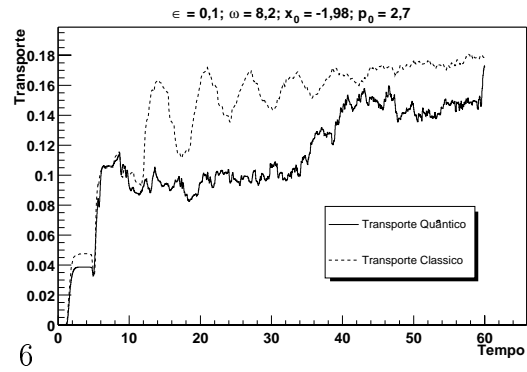
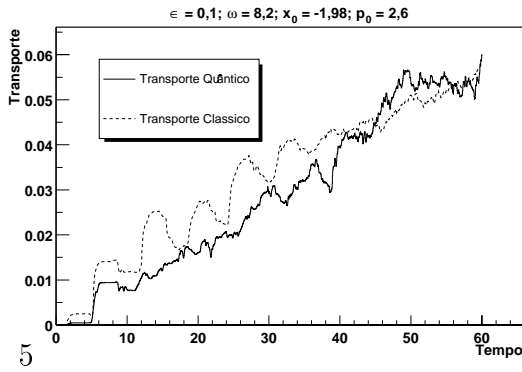
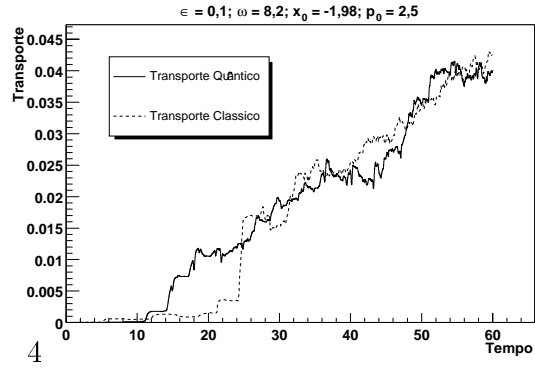
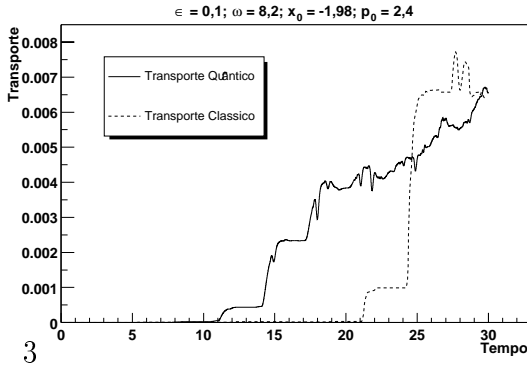
É importante atentar para a escala do eixo de transporte que é peculiar a cada figura, podendo diferir por várias ordens de grandeza entre elas. Na maior parte dos gráficos o transporte é exibido para o intervalo de tempo  $[0, 30]$ , mas em alguns casos este intervalo é  $[0, 60]$ . Para cada frequência exibimos propagações para condições iniciais de momento espaçadas uniformemente de 0,1.

## 5.2 Um caso particular: influência das ressonâncias clássicas.

Nesta seção tratamos do caso em que  $\epsilon = 0,1$  e  $\omega = 8,2$ . A órbita periódica não ressonante à esquerda tem condição inicial  $(-1,98; 0,0)$ , e o ponto de fronteira diretamente acima desta posição tem coordenada  $p = 2,5$ . Há também uma ilha ressonante muito próxima à fronteira, que para  $x = -1,98$  tem limites  $p = 2,6$  e  $p = 2,7$ . Esta ilha forma parte de uma família com quatro elementos, associada a uma órbita periódica ressonante de ordem quatro. A presença desta ressonância tão próxima à ilha principal afeta profundamente o transporte próximo à fronteira e, como veremos, torna este um caso à parte dos demais.



Uma característica marcante dos primeiros quatro gráficos é o fato do transporte clássico ter início notoriamente depois do quântico. É interessante notar



que nestes casos as curvas clássicas apresentam dois degraus, um menor em  $t = 21$  e outro maior um pouco antes de  $t = 25$  (note que do gráfico quatro em diante,  $0 \leq t \leq 60$ ), indicando a contribuição de duas regiões disjuntas. A forma destas curvas é extremamente semelhante e elas diferem basicamente por um fator de escala. Nas curvas de transporte quântico dos gráficos 2,3 e 4 vemos também dois degraus, um perto de  $t = 11$  e outro perto de  $t = 15$ , este último pode ser



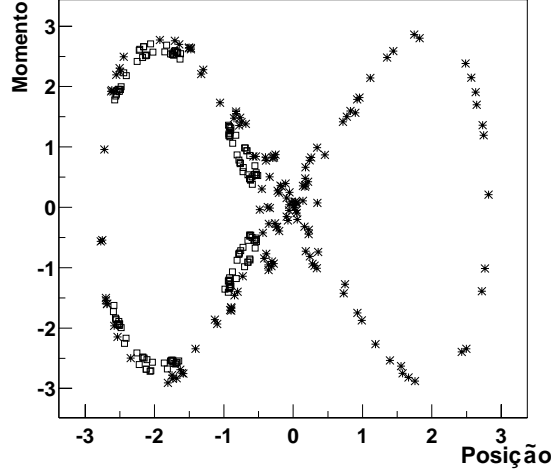


Figura 5.1: Mapa estroboscópico para o intervalo  $[0, 150]$  das órbitas com condições iniciais  $(-1, 98; 2, 55)$  representada por quadrados, e  $(-1, 98; 2, 75)$ , representada por estrelas. Vemos que a primeira, que pertence à camada caótica entre as ilhas, permanece confinada, enquanto a outra atravessa a barreira várias vezes.

identificado surgindo no gráfico 1, quase indistinguível do eixo de posição. Estes degraus das curvas quânticas assemelham-se bastante aos das curvas clássicas, a não ser por um fator de escala, principalmente no segundo. Isto só pode decorrer de um efeito de tunelamento, já que as porções do pacote que tem transporte clássico permitido só atingem a barreira mais tarde.

Para explicar estas características, é preciso primeiro considerar o efeito da família de quatro ilhas ressonantes dispostas ao redor da ilha principal, separadas dela por uma estreita camada de caos. Estas ilhas mostram que o cilindro topológico ao qual estão confinadas suas trajetórias envolve a ilha principal e a camada de caos em uma espiral, realizando uma volta a cada quatro períodos do Hamiltoniano. O cilindro forma uma espécie de cerca de movimento regular em torno da região caótica que dificulta a sua difusão, fazendo com que suas condições iniciais permaneçam mais tempo confinadas. Para ilustrar esta tendência, exibimos na figura 5.1 um mapa estroboscópico de duas condições iniciais:  $(x = -1, 98; p = 2, 55)$ , no interior da camada caótica entre as ilhas, e  $(x = -1, 98; p = 2, 75)$ , imediatamente acima da ilha ressonante, para o intervalo de tempo  $[0, 150]$ . Vemos que a órbita do interior da camada, cujos pontos são representados por quadrados, permanece confinada, enquanto que a outra,

representada por asteriscos, atravessa a barreira diversas vezes.

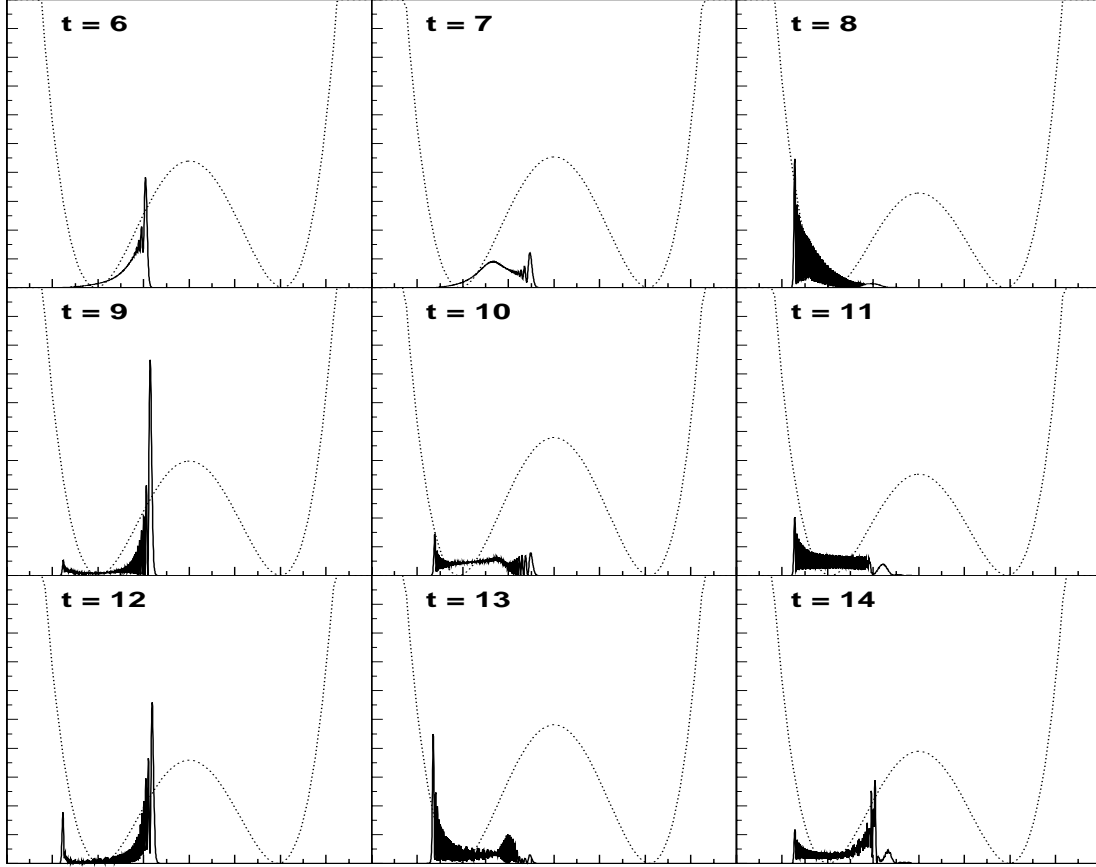


Figura 5.2: Propagação de um pacote de ondas com centro em  $(-1,98; 2,4)$ . O pacote comporta-se como se houvesse uma pequena barreira em torno de  $x = -0,6$ . ESCALA: divisões maiores representam uma unidade, divisões menores representam 0,5

Atentando para a escala dos primeiros gráficos, vemos que o transporte ocorre em ordem de grandeza  $10^{-3}$ . Observando também as condições iniciais às quais correspondem estes quatro casos, percebemos que, dentre as porções dos pacotes com transporte clássico permitido, as mais significativas são por larga margem as que se encontram sobre a camada inter-ilhas (os círculos representam a largura do pacote, porém estes ocupam de fato uma região bem mais extensa). Com estas duas informações, é razoável supor que o primeiro degrau das curvas de transporte clássico represente a passagem das condições iniciais que se encontram além de todas as ilhas. Como as gaussianas são quase nulas nessa região, o transporte é bem pequeno. O segundo degrau parece ser efeito (quântico) da fuga de uma

pequena parcela das condições iniciais localizadas entre as ilhas. Isto nos leva à interessante conclusão que a antecipação do transporte quântico se deve ao tunelamento entre duas regiões caóticas, uma parte do pacote de ondas consegue passar da camada entre as ilhas para o mar de caos exterior. De fato, na figura 5.2, que representa alguns instantes na propagação do pacote com condição inicial  $(-1, 98; 2, 4)$ , vemos que o pacote comporta-se como se hovesse uma barreira menor em torno de  $x = -0,6$ , que é o limite direito em  $x$  da cadeia de ilhas ressonantes. Na verdade, não há nenhum tipo de barreira, apenas um isolamento clássico parcial de duas regiões do espaço de fase.

Prosseguindo com a análise dos gráficos, passamos ao quinto, que corresponde a um pacote inicialmente centrado sobre o ponto de fronteira da ilha não ressonante. Vemos que o transporte neste caso ocorre, para  $t = 30$ , em escala  $10^{-2}$ . Isto está em desacordo com o que observamos em todos os outros casos, onde o transporte para as condições iniciais aproximadamente sobre os pontos de fronteira ocorre sempre em escala  $10^{-1}$ , como pode ser verificado nos exemplos da seção a seguir. Esta é uma diferença marcante, apesar de não ser possível realizar uma comparação quantitativa rigorosa entre os dados para diferentes frequências, uma vez que a forma das ilhas não ressonantes varia. Isto é, até para afastamentos iguais do centro do pacote ao ponto de fronteira, a sua distribuição entre regiões regulares e caóticas nunca é a mesma. Vemos que o transporte clássico só atinge ordem  $10^{-1}$  para  $p = 2, 7$  (gráfico 6), sobre a fronteira da ilha ressonante. Assim, quanto à magnitude do transporte, este sistema comporta-se como se sua fronteira entre caos e regularidade fosse a do cilindro ressonante.

A partir de  $p_0 = 2, 6$  (gráfico 5) torna-se aparente uma oscilação de período aproximadamente 6 nas curvas de transporte clássico, cuja presença pode ser detectada também no transporte quântico, em forma residual nos gráficos 5 e 6 ( $p_0 = 2, 6$  e  $p_0 = 2, 7$ ), e claramente nos gráficos 7 e 8 ( $p_0 = 2, 8$  e  $p_0 = 2, 8$ ).

Atribuímos esta oscilação à presença de uma famílias de ilhas de ressonância de ordem oito (isto é, famílias de oito ilhas cada uma) nas proximidades do pacote inicial.

Observamos que, para  $\omega = 8, 2$ ,

$$T = \frac{2\pi}{\omega} \simeq 0,766; \text{ e portanto, } 8T = 6,130$$

um valor certamente muito próximo do período que se observa nos gráficos

Olhando cuidadosamente o mapa estroboscópico é possível identificar seis das ilhas desta família, duas com centros em  $x = 0$  e momentos  $p = 1, 0$  e  $p = -1, 0$ , e outras quatro centradas em  $x = -1$  e  $x = +1$ , com  $p = -2, 3$  e  $p = 2, 3$ . As duas restantes estão imersas nas estreitas faixas de caos próximas aos extremos em  $x$  do mapa, como pode ser comprovado na figura 5.3 que mostra o mapa

estroboscópico para uma condição inicial próxima ao centro de uma das ilhas para oito períodos do Hamiltoniano.

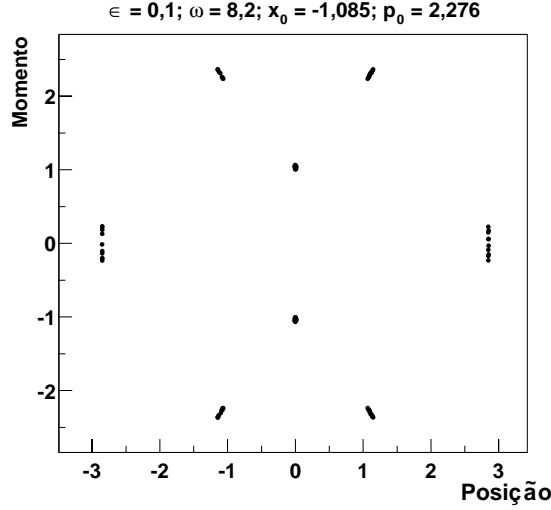


Figura 5.3: Mapa estroboscópico da condição inicial  $(-1,081; 2,276)$  para oitenta períodos do Hamiltoniano, ou dez períodos da órbita periódica ressonante. Esta condição inicial pertence a uma das ilhas e vemos que a órbita passa sempre por algum elemento da família.

Uma diferença fundamental entre os pacotes clássico e quântico, é o comportamento esperado para tempos muito longos. Para o pacote quântico espera-se o alargamento total, de forma que este se estenda por toda a amplitude do poço duplo e seja igualmente provável encontrá-lo de um lado ou de outro da barreira. Isto é, da forma como definimos o transporte quântico (ver expressão 4.1), esperaríamos ver estas curvas tendendo ao valor 0,5 para  $t$  grande. Em alguns casos o tempo para que isto aconteça é demasiadamente longo, mas para os parâmetros do Hamiltoniano que escolhemos nesta seção, podemos ver uma situação próxima à que descrevemos, no gráfico 8 ( $p = 2,9$ ). Para o pacote clássico esperamos que apenas a parte com energia superior à da barreira se espalhe pelos dois poços, as componentes de menor energia permanecem infinitamente confinadas ao seu poço de origem, enquanto que a porção que é classicamente transmitida atinge um equilíbrio dinâmico entre componentes de um lado e de outro da barreira e distribui-se uniformemente.

Nos três últimos gráficos, 6, 7 e 8 ( $p = 2,7$ ,  $p = 2,8$ ,  $p = 2,9$ ) vemos o pacote clássico bastante próximo deste equilíbrio dinâmico, e percebemos também algo que é bastante intuitivo: quanto mais lentamente se dá o transporte, menos ele

oscila acima do valor assintótico, já que o pacote espalha muito antes de atravessar a barreira.

### 5.3 Caos e tunelamento

Na seção anterior observamos alguns efeitos bastante interessantes de tunelamento em um sistema misto. No entanto, devido às peculiaridades da dinâmica clássica, não foi possível observar isoladamente a influência do caos sobre o tunelamento. Nesta seção procuraremos mostrar algumas evidências desse tipo de efeito.

Uma característica dos sistemas caóticos é que os parâmetros do Hamiltoniano costumam ter uma influência dramática sobre a dinâmica. Verificamos isto através de exemplos no capítulo 2. No nosso caso a amplitude e a frequência de oscilação afetam fortemente o tamanho das ilhas não ressonantes assim como determinam a existência, número, localização e tamanho das ilhas ressonantes. Percebemos que à primeira vista é difícil determinar até mesmo se um movimento ressonante é ou não confinado a um dos poços. Sabemos que, apesar da forma brusca com que o comportamento clássico parece alterar-se com os parâmetros e condições iniciais, todas as mudanças se dão de maneira contínua. Assim, a presença de ilhas regulares afeta profundamente a dinâmica caótica nas suas proximidades. Por estes motivos ficou claro ao longo do nosso trabalho, que há muito pouco sentido em comparar diretamente os valores de transporte para parâmetros diferentes do Hamiltoniano.

Como mencionamos na introdução deste capítulo, a transmissão de um pacote de ondas quântico através de uma barreira é uma mistura da passagem classicamente permitida de componentes de energia alta, com o tunelamento. Além disto, o tunelamento é tão mais favorecido quanto mais próximas estiverem as condições de propagação daquelas classicamente permitidas. Isto é, mesmo uma onda plana tunela mais quanto mais próxima for sua energia à da barreira. Percebemos que a grandeza de interesse em nosso problema é a relação entre transporte clássico e quântico de um dado pacote e para um dado conjunto de parâmetros. Ou seja, ao olharmos resultados obtidos com parâmetros diferentes, estaremos interessados em comparar algo como a razão entre os transportes clássico e quântico em cada um dos casos, e a forma geral dos gráficos, que como vimos na seção anterior contém bastante informação sobre as peculiaridades de cada situação. Por estes motivos, nos restringiremos a uma análise qualitativa dos resultados. Veremos no entanto que isto será suficiente para revelar algumas propriedades interessantes do transporte de pacotes de onda localizados.

Apresentaremos resultados de transporte clássico e quântico para  $\epsilon = 0, 1$  e frequências  $\omega = 2, 4$ ,  $\omega = 2, 3$ ,  $\omega = 4, 3$ ,  $\omega = 0, 5$ , além do caso integrável,  $\epsilon = 0, 0$ .

O ordenamento foi feito de acordo com o tamanho das ilhas não ressonantes, de maneira crescente. Como mencionado no capítulo 2, para  $\epsilon$  fixo há um ponto a partir do qual incrementos de frequência podem ter o efeito de diminuir a perturbação. Vemos isto neste caso, em que há mais movimento regular para  $\omega = 4,3$  do que para  $\omega = 2,4$  e  $\omega = 2,3$  (ver os mapas estroboscópicos no início de 5.3.3, 5.3.1, 5.3.2 respectivamente).

Talvez a característica mais marcante dos resultados que seguem é, como havíamos antecipado no começo da seção, que o transporte clássico supera o quântico na maior parte das propagações. De uma maneira geral, quanto mais afastada é a condição inicial do ponto de fronteira, maior é o transporte clássico se comparado ao quântico. A única exceção discernível a esta tendência ocorre para as frequências  $\omega = 2,4$  e  $\omega = 2,3$  e momentos, distando em torno de 0,2 da fronteira,  $p_0 = 0,2$  e  $p_0 = 0,8$  respectivamente (5.3.1 gráfico 1 e 5.3.2 gráfico 2). Explicaremos estes casos mais adiante.

Também podemos dizer que, em geral, os transportes clássico e quântico são tão mais semelhantes quanto mais caótico for o espaço de fase. Há um exemplo bastante claro disto nas propagações de pacotes com momentos iniciais que distam em torno de 0,3 do ponto de fronteira, são eles:  $(\omega = 2,3; p = 0,7)$ ,  $(\omega = 4,3; p = 1,4)$ ,  $(\omega = 0,5; p = 2,5)$ , os primeiros gráficos de 5.3.2, 5.3.3, 5.3.3 respectivamente. No primeiro caso, as curvas clássica e quântica são próximas e sua diferença pode ser estimada em torno de 10%, podemos então dizer, apenas para efeito de uma comparação aproximada, que o transporte quântico representa 90% do clássico. No segundo caso,  $\omega = 4,3$ , é bastante claro que o transporte quântico representa pouco mais do que 25% do transporte clássico, para  $\omega = 0,5$  em torno de 10% apenas e para o caso regular 3%. Por mais inadequadas que sejam estas análises percentuais, elas são úteis para chamar a atenção para a diferença marcante que há entre os quatro casos.

Além da tendência global comentada acima, vemos uma grande semelhança entre os casos  $\omega = 0,5$  (5.3.4) e  $\epsilon = 0,0$  (5.3.5), principalmente se os gráficos forem vistos em escala de tempo apropriada. Isto é, comparando  $\omega = 0,5$ ,  $p = 2,5$  e  $p = 2,6$  (5.3.4 gráficos 1 e 2) no intervalo  $0 \leq t \leq 30$ , com  $\epsilon = 0,0$ ,  $p = 2,5$  e  $p = 2,6$  (5.3.5 gráficos 2 e 3) no intervalo  $0 \leq t \leq 5$ , e  $\omega = 0,5$   $p = 2,7$  (5.3.4 gráfico 3) no intervalo  $0 \leq t \leq 30$  com  $\epsilon = 0,0$   $p = 2,7$  (5.3.5 gráfico 4) no intervalo  $0 \leq t \leq 15$ .

A primeira observação, sobre a dependência da diferença entre os transportes com relação à distância da fronteira, aponta para o fato de haver reflexão quântica acentuada dos componentes do pacote com energia muito próxima da barreira. Para condições iniciais profundamente inseridas nas ilhas regulares, isto é, com momentos baixos com relação ao ponto de fronteira, apenas a porção do pacote muito próxima à fronteira contribui para o transporte. O tunelamento da parte

dentro da ilha é mínimo devido à baixa energia, e a porção do pacote mais afastada da fronteira tem amplitude desprezível e por isso não contribui para o transporte. Assim, como as únicas componentes participando do transporte quântico sofrem reflexão, os efeitos deste fenômeno se fazem notar de maneira acentuada. Vemos um exemplo claro disto nos casos  $\omega = 2, 3; p = 0, 8$  e  $\omega = 2, 4; p = 0, 2$ , (5.3.2 gráfico 2 e 5.3.2 gráfico 1) que mencionamos anteriormente sem explicar. Nas ampliações dos respectivos mapas estroboscópicos, onde estão representados os pacotes iniciais, fica evidente como a curvatura acentuada das fronteiras faz com que uma parte maior do pacote esteja em contato com elas. Isto explica a redução acentuada no transporte quântico, que não vem acompanhada por efeito semelhante no transporte clássico. Também explica porque, para as propagações em que o pacote é centrado sobre a fronteira, o transporte quântico supera o clássico de maneira menos acentuada do que se esperaria por motivo que ficará claro mais adiante.

À medida em que o momento é aumentado o pacote passa a ter amplitude significativa fora das imediações da fronteira. Nesta região a reflexão quântica é menor, fazendo com que haja um aumento grande no transporte total, tornando o efeito da fronteira menos perceptível, embora não menos presente.

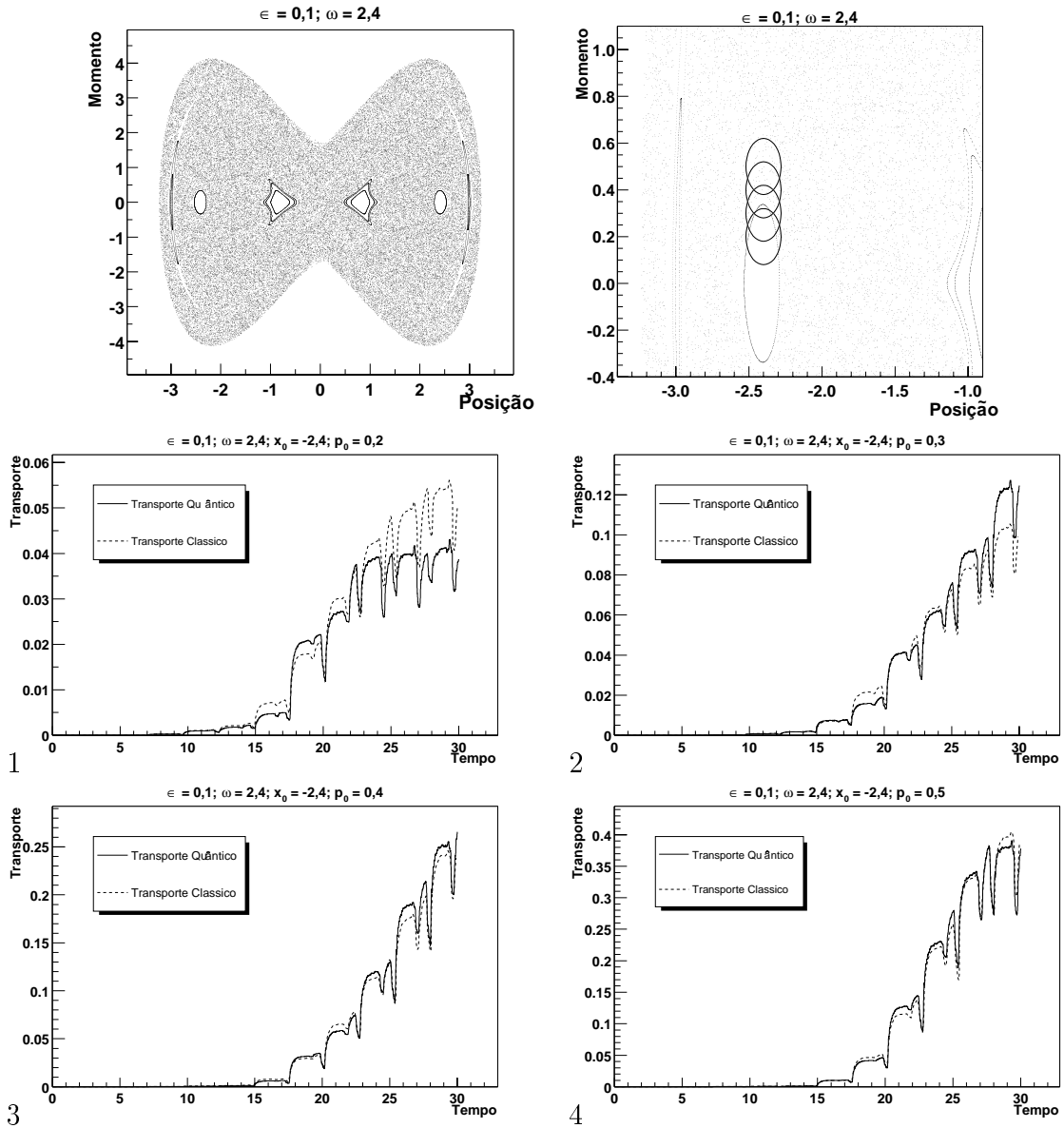
Resumindo as observações feitas nesta seção, vimos nestes exemplos que quanto maior a presença de caos no espaço de fase, mais parecidos são os transportes clássico e quântico; na ausência de caos o transporte quântico é muito inferior ao clássico. Além disto, parece bastante claro que a diferença entre os dois transportes se deve a um efeito de reflexão quântica das componentes do pacote que classicamente são transmitidas. A peculiaridade da redução do transporte quântico devido à curvatura da ilha que ocorre para  $\omega = 2, 4$  e  $\omega = 2, 3$  (mapas e ampliações em 5.3.1 e 5.3.2) parece indicar que o caos tem pouco efeito no sentido de amenizar este fenômeno.

Assim, podemos concluir que nos exemplos desta seção observamos o favorecimento, pelo caos, do tunelamento das porções dos pacotes situadas no interior das ilhas. Nos casos  $\omega = 2, 4$  e  $\omega = 2, 3$  (5.3.1 e 5.3.2) a curvatura acentuada das fronteiras fez com que os pacotes estivessem menos situados em seu interior, reduzindo a manifestação deste efeito.

### 5.3.1 Caso 1: $\epsilon = 0,1$ ; $\omega = 2,4$

Centro da ilha não ressonante à esquerda:  $(-2, 4; 0, 0)$ ,

Coordenada de momento do ponto de fronteira para  $x = -2, 4$ :  $p = 0, 37$ .

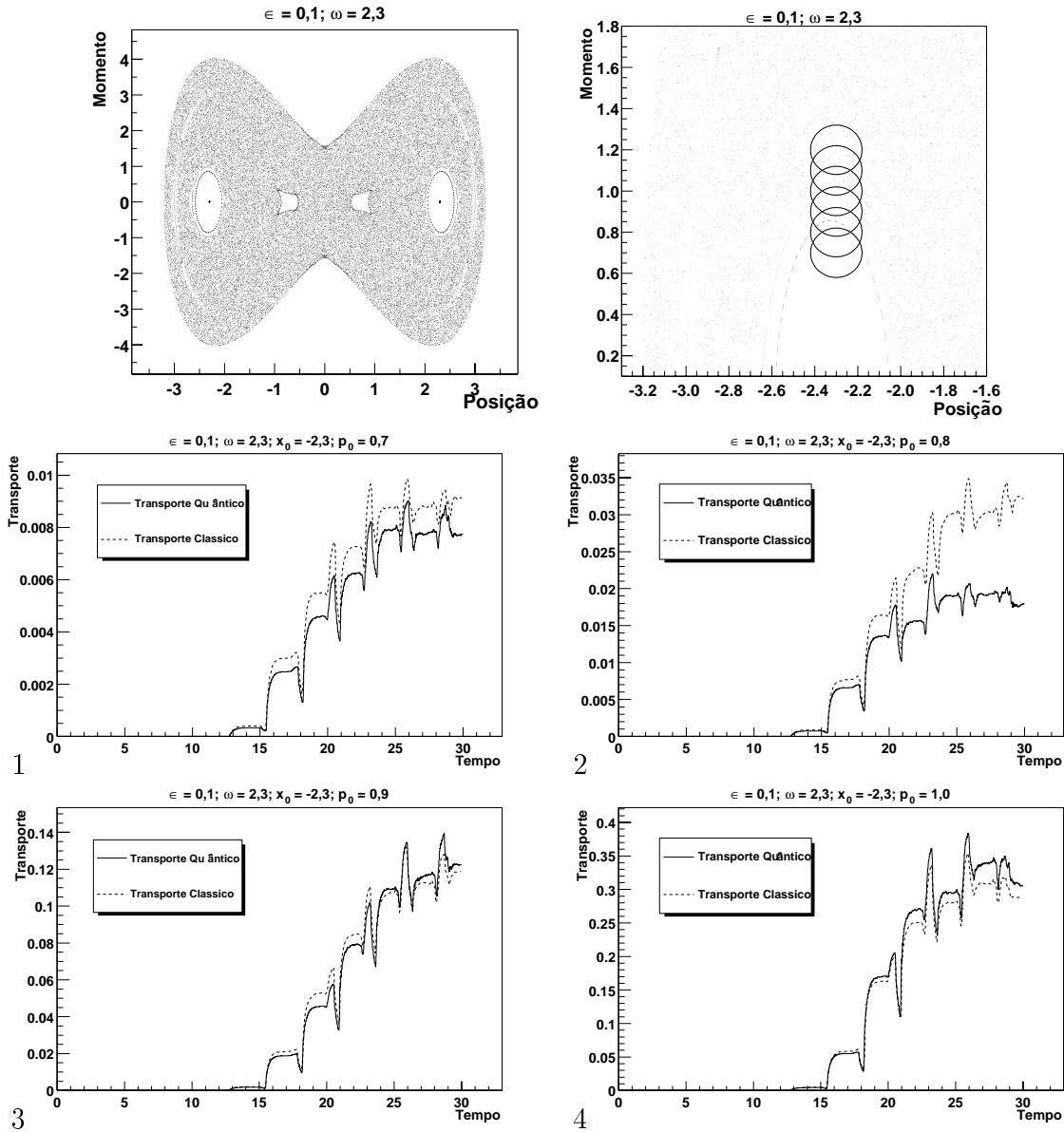


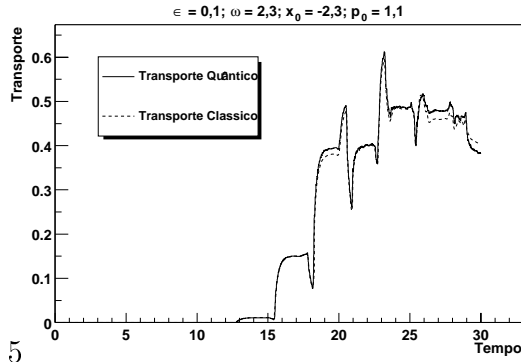


### 5.3.2 Caso 2: $\epsilon = 0,1$ ; $\omega = 2,3$

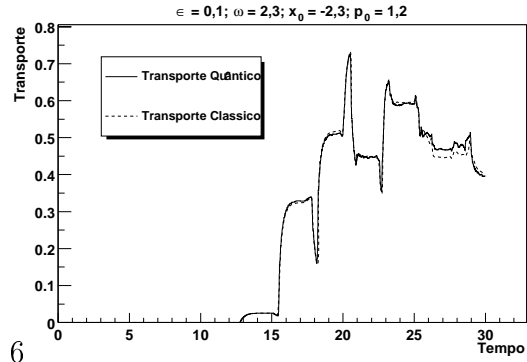
Centro da ilha não ressonante à esquerda:  $(-2,3;0,0)$

Coordenada de momento do ponto de fronteira para  $x = -2,2$ :  $p = 1,0$ .





5

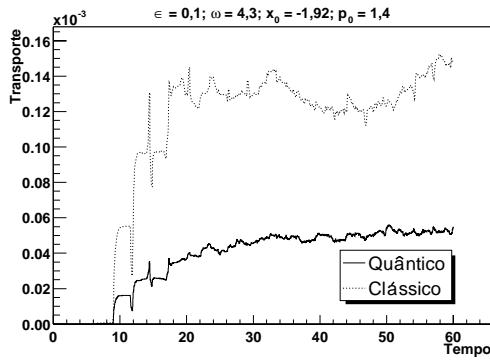
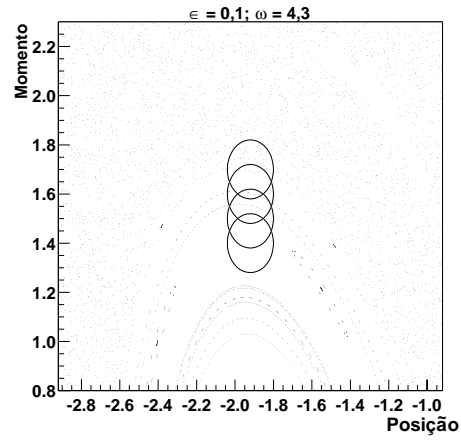
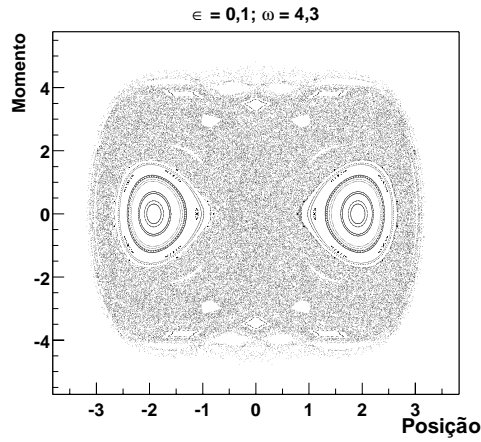


6

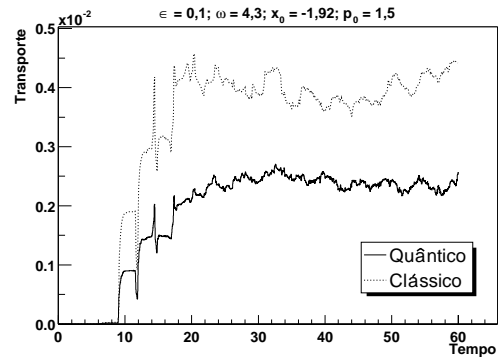
### 5.3.3 Caso 3: $\epsilon = 0,1; \omega = 4,3$

Centro da ilha não ressonante à esquerda:  $(-1,92; 0,0)$

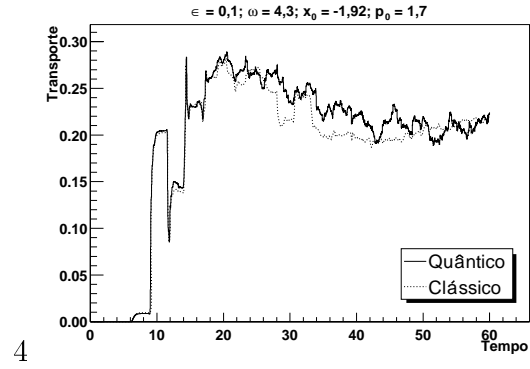
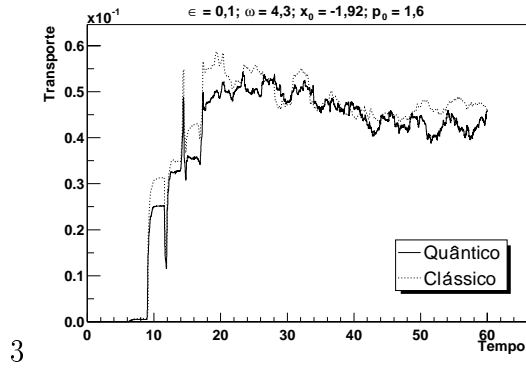
Coordenada de momento do ponto de fronteira para  $x = -1,92$ :  $p = 2,68$ .



1



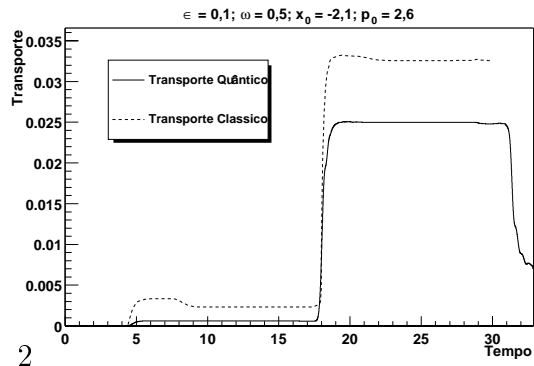
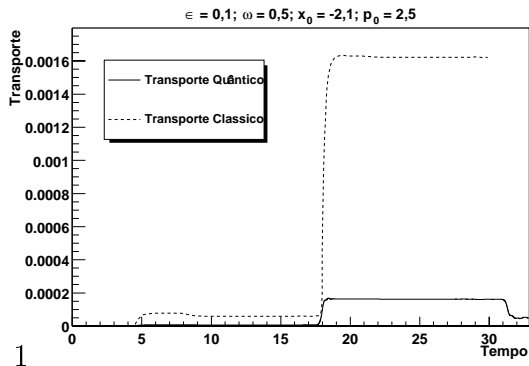
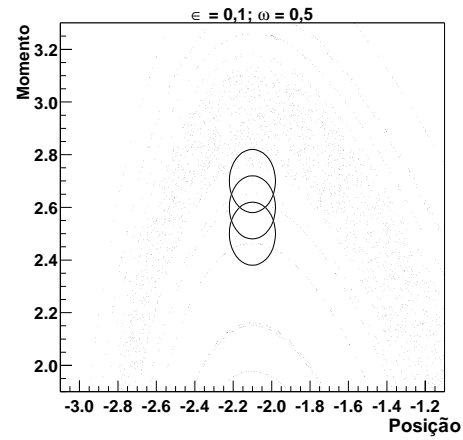
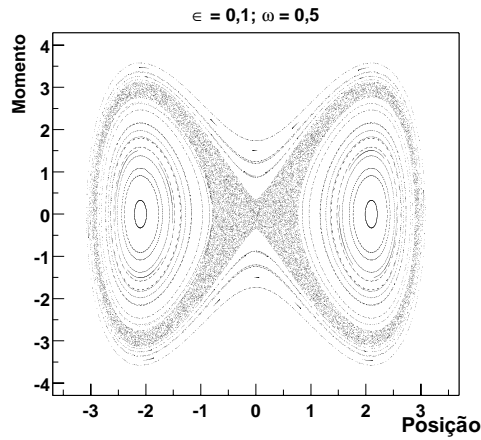
2

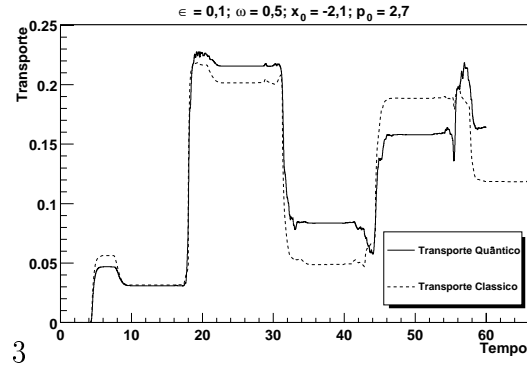


### 5.3.4 Caso 4: $\epsilon = 0,1; \omega = 0,5$

Centro da ilha não ressonante à esquerda:  $(-2,1;0,0)$

Coordenada de momento do ponto de fronteira para  $x = -2,1$ :  $p = 2,7$ .

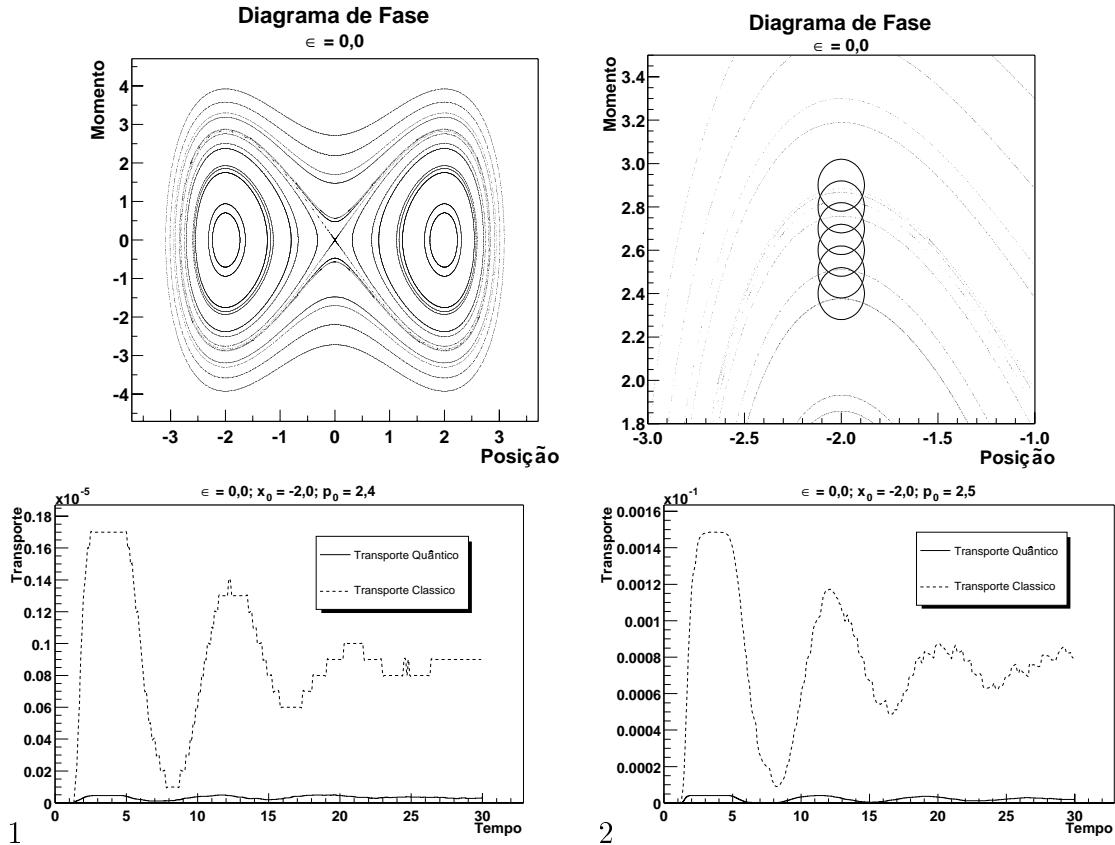


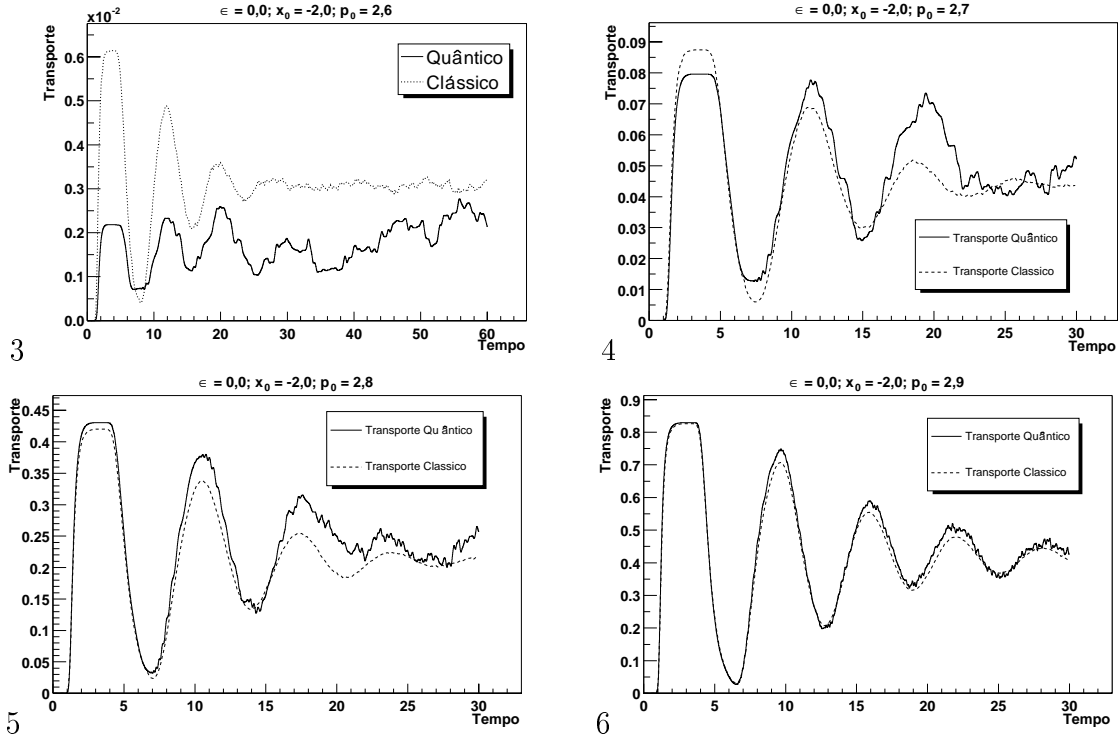


### 5.3.5 Caso 5: $\epsilon = 0,0$ ; dinâmica regular

Centro da ilha não ressonante à esquerda:  $(-2,0;0,0)$

Coordenada de momento do ponto de fronteira para  $x = -2,0$ :  $p = \sqrt{8} \simeq 2,83$ .





## 5.4 Dubletos de Tunelamento

Nas simulações feitas com pacotes localizados, pudemos observar o favorecimento do tunelamento pelo caos. No entanto não conseguimos detectar evidências do mecanismo através do qual isto se dá. Como nosso sistema é simétrico, acreditávamos que a influência do caos se manifestasse no alargamento dos dubletos de tunelamento, como exposto na introdução. Para detectar diretamente este efeito, fizemos algumas simulações com pacotes mais largos, com tamanho parecido ao das ilhas regulares do mapa estroboscópico clássico. Sabendo que existem estados de Floquet do sistema quântico localizados sobre as ilhas regulares, imaginamos que alargando os pacotes localizados sobre as ilhas garantiríamos uma grande contribuição desses estados na sua composição. A seguir, exibimos um resultado destas simulações, obtido para  $\epsilon = 0,1$  e  $\omega = 2,3$ , parâmetros que geram o mapa estroboscópico de 5.3.2, e

$$a = 0,283 \quad \hbar = 0,267 \quad e \quad b = \frac{\hbar}{a} = 0,943$$

Estes valores de semi-larguras são ainda um pouco menores do que os semi-eixos da ilha regular, que é aproximadamente elíptica, pois queríamos um pacote largo, mas também queríamos limitar o transporte classicamente permitido de

forma que os efeitos quânticos sobressaíssem.

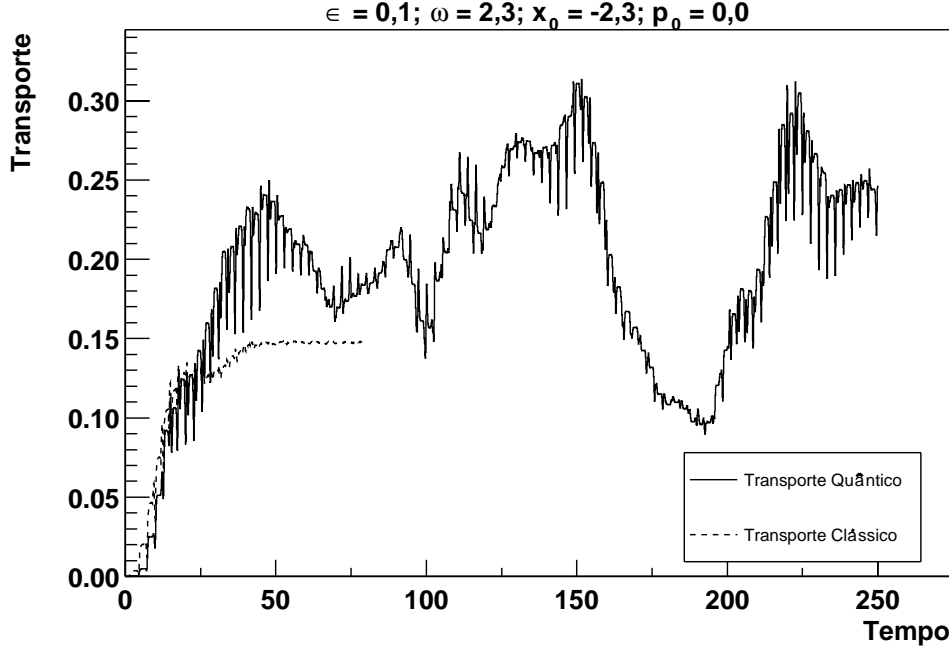


Figura 5.4: Curvas de transporte para um pacote centrado em  $(-2, 3; 0, 0)$  com  $a = 0,283$ ,  $\hbar = 0,26$ ,  $b = 0,943$ .

Como vemos na figura 5.4, o transporte clássico atinge o equilíbrio para  $t \simeq 40$ , enquanto o quântico parece estar longe de estabilizar-se mesmo para  $t = 250$ . Na curva quântica aparecem duas componentes oscilatórias de forma bastante distinta. Nos casos anteriores exibimos propagações para intervalos de tempo muito mais curtos. Para certificarmos de que não estávamos observando um comportamento característico para tempos longos, repetimos um dos cálculos da seção 5.3.2 (gráfico 3) para o mesmo intervalo, o resultado está exibido na figura 5.5. O momento inicial utilizado foi  $p = 0,9$ , e a posição inicial, semi-largura e valor de  $\hbar$  são os mesmos utilizados em 5.3.2. Fica claro que as oscilações do transporte observadas no caso do pacote largo não estão presentes aqui. O fato de o transporte quântico exceder o clássico para tempos longos não é surpreendente, já que como comentamos anteriormente, a situação de equilíbrio do pacote quântico é o alargamento total e a distribuição homogênea entre os dois poços, enquanto classicamente isto só ocorre para as porções do pacote com energia mais alta.

Acreditamos que as oscilações visíveis no transporte do pacote largo sejam a marca dos dubletos em sua composição. A oscilação de período maior está

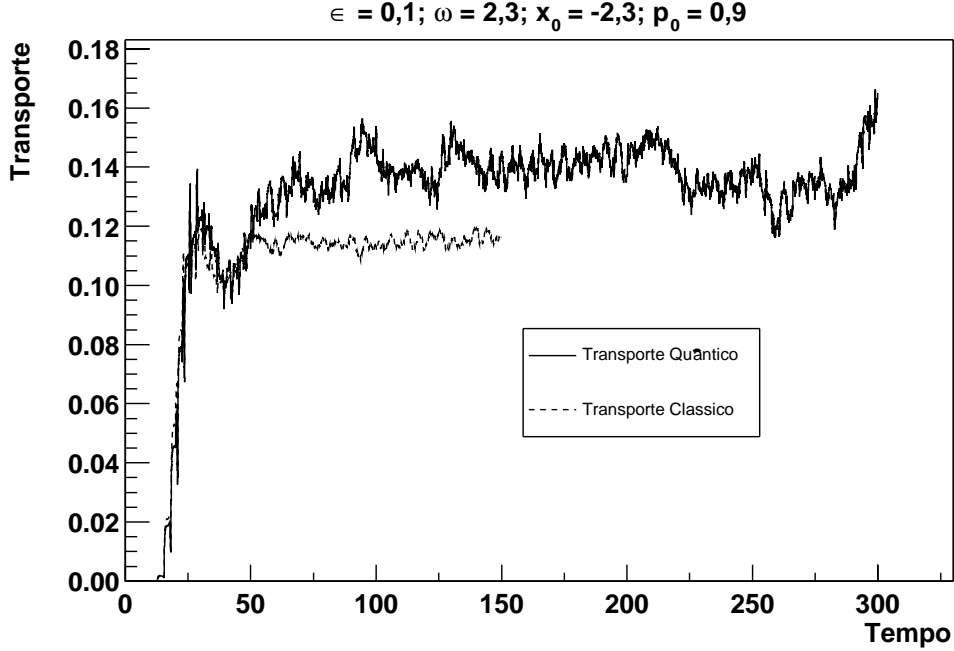


Figura 5.5: Curvas de transporte para um pacote de ondas com semi-larguras  $a = 0,12$ ,  $b = 0,12$ , e  $\hbar = 0,0144$ , condição inicial  $(-2,3, 0,9)$  para  $\epsilon = 0,1$  e  $\omega = 2,3$ .

provavelmente associada à presença do dubleto do estado fundamental de Floquet, enquanto que a de período menor, que pode ser vista com mais nitidez na figura 5.6, corresponde a um dubleto com maior separação entre as energias, já que o período depende inversamente do afastamento dos níveis. Uma forma de testar estas suposições é verificar a coerência do pacote pois, como discutido na introdução, as oscilações associadas a dubletos são coerentes. Na figura 5.7 vemos o pacote de ondas em alguns instantes diferentes. O primeiro quadro mostra o pacote nos instantes  $t = 24$  e  $t = 62$ , dois máximos da oscilação de período curto. O segundo e o terceiro mostram os instantes  $t = 152$ ,  $t = 244$ , e  $t = 150$ ,  $t = 224$  respectivamente, que são máximos da oscilação de período longo. No quadro dois, os instantes correspondem também a mínimos da oscilação curta e no quadro três a máximos desta mesma oscilação. Vemos que os pacotes correspondentes a fases iguais da oscilação curta são muito semelhantes mesmo quando separados por intervalos de tempo longos. Comparando estas figuras com outras apresentadas neste trabalho para pacotes de ondas localizados propagando por intervalos muito mais curtos, percebemos o imenso ganho de coerência que há neste caso.

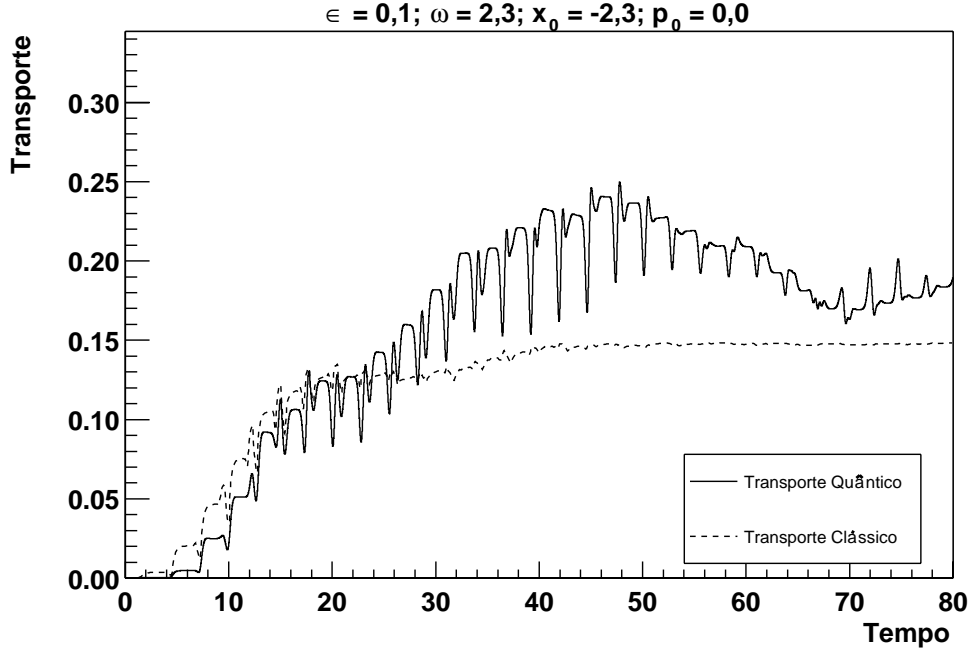


Figura 5.6: Curvas de transporte para um pacote centrado em  $(-2, 3; 0, 0)$  com  $a = 0,283$ ,  $\hbar = 0,26$ ,  $b = 0,943$ .

Detectamos portanto o mecanismo de tunelamento assistido por caos atuando em nosso sistema. Parece ser este mesmo efeito que favorece o tunelamento dos pacotes localizados. Nestes últimos casos no entanto, sua manifestação é atenuada pela presença de muitos níveis, que dependem de maneira diferente dos parâmetros do Hamiltoniano. A composição complicada também destrói a coerência para tempos longos.



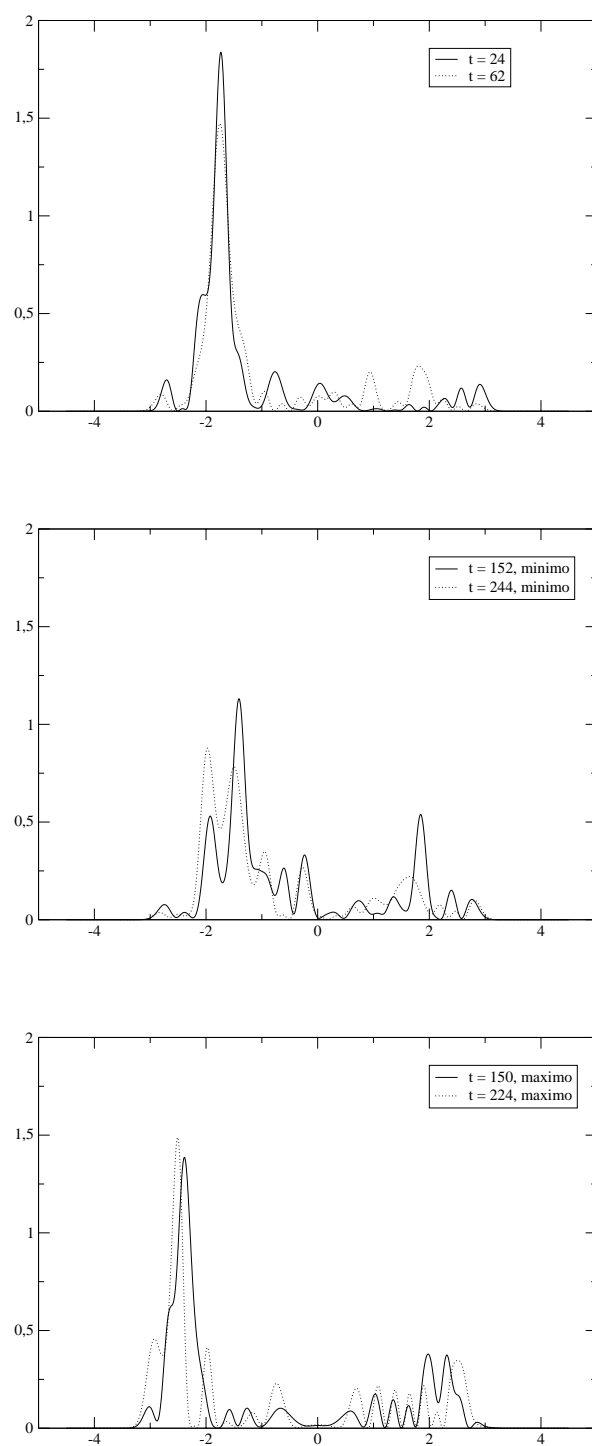


Figura 5.7: O pacote largo em alguns instantes de tempo

# Capítulo 6

## Conclusões

Iniciamos o trabalho com o objetivo de investigar a influência do caos no tunelamento de partículas. Para isto, as representamos semiclassicamente por pacotes de onda localizados, várias vezes menores do que as ilhas regulares do espaço de fase do nosso sistema modelo. Queríamos compreender a manifestação do mecanismo de tunelamento assistido por caos no caso de estados localizados (compostos por um grande número de auto estados), já que a ênfase dos trabalhos recentes tem sido estudar este efeito em estados do tipo dubleto.

Nosso estudo não apontou para novas manifestações do tunelamento assistido por caos já que, embora tenhamos observado o favorecimento do tunelamento pelo caos em nossos estados localizados, observamos também que este efeito aparece de maneira atenuada quando comparado ao caso dos estados do tipo dubleto. Nós mesmos, embora não dispuséssemos das quasi-energias para identificar as grandes alterações no espectro em função dos parâmetros do Hamiltoniano, detectamos em um caso a marca dos dubletos de tunelamento quando experimentamos cálculos com estados menos localizados.

No entanto, percebemos alguns efeitos interessantes relacionados a pacotes de ondas estreitos. Em primeiro lugar, para estes casos, o efeito quântico que se manifesta de maneira mais marcante é a reflexão e não o tunelamento, já que as regiões de interesse nestes casos são as imediações da fronteira entre o transporte clássico permitido e o proibido. O aumento do efeito de tunelamento provocado pela presença de caos manifesta-se reduzindo a diferença entre a transmissão quântica e a clássica. Podemos dizer que a maior “ajuda” que o mar caótico consegue dar é tornar as transmissões aproximadamente iguais.

Outro efeito interessante é que os pacotes estreitos são capazes de perceber detalhes da dinâmica clássica, seu movimento em muitos casos segue de maneira próxima as órbitas clássicas. Observamos o confinamento do pacote por uma cadeia de ilhas ressonantes e também a atenuação deste efeito através do tunela-

mento. Neste caso houve um fator de interesse adicional, pois o tunelamento teve lugar entre duas regiões caóticas, apenas parcialmente isoladas do ponto de vista clássico.

# Bibliografia

- [1] E.J. Heller, Phys. Rev. Lett. **53**, 1515 (1984)
- [2] O. Bohigas, S.Tomsovic, D. Ullmo, Phys. Rep. **223** 43 (1993)
- [3] M.J. Davis e E.J. Heller, J. Chem. Phys. **75**,246 (1981)
- [4] “*Quantum tunneling and chaotic dynamics*” - O.Bohigas, D.Boosé, R.Egydio de Carvalho, V.Marvulle, Nucl. Phys. A**560** (1993) 197.
- [5] M. Baranger, K.T.R. Davies, J.H. Mahoney, Ann. Phys (NY) **186** (1988) 95
- [6] *Chaos-assisted tunneling* - Steven Tomsovic, Denis Ullmo, Phys.Rev.E vol. **50** No.**1**, 145, (1994)
- [7] John H. Shirley, Phys.Rev. vol. **138** **4B**, 979 (1965)
- [8] W.A.Lin, L.E.Ballentine, Phys.Rev.Lett **65** (1990) 2927
- [9] F. Grossmann, T. Dittrich, P.Jung e P. Hänggi, Phys. Rev. Lett., **67**, 516 (1991)
- [10] J. Plata, J.M. Gomez Llorente J.Phys. A **25** (1992) L303
- [11] P.Hänggi, s.Kohler e T.Dittrich, “Driven Tunneling:Chaos and Decoherence” cond-mat/9910200 13 Oct 1999
- [12] C.Debowski, H.-D. Gräf, A. Heine, R. Hofferbert, H. Rehfeld e A. Richter Phys. Rev. Lett., **84** 867 (2001)
- [13] W.K. Hensinger et.al. “Dynamical tunnelling of ultracold atoms” Nature **412**, 52 (2001)
- [14] D.A.Steck, W.H.Oskay, M.G.Raizen, Science, **293**, 274, (2001)
- [15] W.A. Lin e L.E. Ballentine Phys.Rev.A **45** (1992) 3637

- [16] *Numerical Recipies in C, the Art of Scientific Computing*, 2<sup>a</sup> Ed. W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, Cambridge University Press.
- [17] “*Convergent Method for Calculating the Eigenvalues of Anharmonic Potentials*” - M.A.M. de Aguiar e A.L. Xavier Jr. Physics Letters A**164** (1992) 279-283